Sections efficaces totales d'une molécule diatomique dans l'approximation de Born-Oppenheimer

Thierry Jecko

Université de Nantes
Faculté des sciences et des techniques

Sections efficaces totales d'une molécule diatomique dans l'approximation de Born-Oppenheimer

Thèse de doctorat
École doctorale de mathématiques de l'Ouest
Discipline : mathématiques

présentée et soutenue publiquement par

Thierry JECKO

le 14 octobre 1996 devant le jury ci-dessous

Président	M. ROBERT Didier, professeur, Université de Nantes
Rapporteurs	M. COMBES Jean-Michel, professeur, Centre de Physique théorique, Marseille
	M. MARTINEZ André, professeur, Université de Paris-Nord, Villetaneuse
Examinateurs	M. BOLLEY Pierre, professeur, Université de Nantes
	M. HELFFER Bernard, professeur, Université de Paris XI, Orsay
	M. WANG Xue Ping, professeur, Université de Nantes

Directeur de thèse : M. WANG Xue Ping

Introduction.

En 1927, M.Born et R.Oppenheimer introduisaient ce qui allait devenir l'approximation de Born-Oppenheimer, une approche essentielle pour la chimie moléculaire. En vue de décrire les niveaux d'énergie moléculaires, leur idée consistait à profiter du fait que les rapports de la masse de l'électron à celles des noyaux sont très petits pour effectuer des développements en puissances de h, un petit paramètre relié à ces rapports.

Cette approximation, validée par l'expérience, n'avait cependant pas de justification théorique rigoureuse (cf. [S]). Il a fallu attendre les années soixante-dix pour que cette question soit abordée. Pour l'étude des spectres discrets moléculaires, citons dans l'ordre chronologique [CDS] (1981), [Ha1] (1987), [Ma1] (1989) et [KMSW] (1992). La généralité de la méthode a permis de l'appliquer à d'autres problèmes de la mécanique quantique. Pour les résonnances, on peut consulter [Ma3] (1991), [MM] (1994) et [Me] (1994). Pour les problèmes d'évolution, il existe une approche temporelle qui a été notamment développée dans [Ha2] (1991), [MN] (1994), [HJ] (1995), dans laquelle le temps reste fini. Cette approche s'étend à l'étude à temps infini de l'évolution d'un pacquet d'onde gaussien dans [Kar](1994). Des applications dans la théorie de la diffusion semblent possibles. Quoique proche de [Kar], le présent travail s'inscrit plutôt dans l'approche stationnaire de la diffusion. Pour cette approche, citons [CT] (1984), [Ra] (1986), [KMW1] (1993) et [KMW2] (1995).

Le cadre de cette thèse est précisément celui de [KMW1] (voir aussi [Ra]). On considère une molécule diatomique à N électrons. La mécanique quantique prédit que le comportement de cette molécule est donné par son opérateur d'énergie, l'opérateur auto-adjoint agissant dans $L^2(I\!R^{3(N+2)})$:

$$H = -\frac{1}{2m_1}\Delta_{x_1} - \frac{1}{2m_2}\Delta_{x_2} + \sum_{j=3}^{N+2}(-\frac{1}{2})\Delta_{x_j} + \sum_{i<j} V_{ij}(x_i - x_j).$$

(on a fixé la masse des électrons à 1 ainsi que la constante de Planck). Les masses respectives des deux noyaux, m_1 et m_2, sont donc grandes, les fonctions réelles V_{ij} représentent les interactions bilatérales des particules. On se place dans la situation plus générale où l'espace dans lequel se trouvent les particules est de dimension $n \geq 2$. L'opérateur précédent agit donc dans $L^2(I\!R^{n(N+2)})$.

Soit $a = (A_1, A_2)$ une décomposition de $< 1, N+2 >$ en deux amas telle que $j \in A_j$, pour $j \in \{1, 2\}$. On effectue un changement de variables et on retire le centre de masse. On se ramène à l'étude de l'opérateur :

$$P = -h^2\Delta_x + P^a + I_a,$$

agissant dans $L^2(I\!R^{n(N+1)})$. Le réel positif h sera le petit paramètre, l'hamiltonien interne P^a est la somme des opérateurs d'énergie de chaque amas, considéré comme isolé, et le potentiel inter-amas I_a rassemble les interactions entre particules de deux amas différents. La variable $x \in I\!R^n$ représente la position relative des centres de masse des amas. Ainsi l'opérateur $-h^2\Delta_x$ correspond à l'énergie cinétique du mouvement relatif de ces centres de masse. En faisant abstraction de ce terme, considérons la famille d'opérateurs $\{P_e(x), x \in I\!R^n\}$ définie par :

$$P_e(x) = P^a + I_a(x), \ \forall x \in I\!R^n.$$

L'hamiltonien $P_e(x)$ est l'opérateur d'énergie du système constitué des N électrons, en interaction entre eux et placés dans le champ extérieur crée par les noyaux dont la position relative est liée au paramètre x. C'est l'hamiltonien électronique. On a :

$$P = -h^2\Delta_x + P_e.$$

On s'intéresse aux états du système dont l'évolution ressemble, asymptotiquement, à l'évolution libre d'états liés dans A_1 et A_2. Une telle évolution est donnée par le propagateur de l'opérateur :

$$P_a \equiv -h^2\Delta_x + P^a$$

restreint à un sous-espace propre de P^a. Soit E_0 une valeur propre du spectre discret de P^a de multiplicité m. On suppose qu'il existe exactement m "courbes" $\lambda_1(x), \ldots, \lambda_m(x)$ de valeurs propres de $P_e(x)$ qui converge vers E_0 lorsque $|x|$ tend vers l'infini. De plus, on suppose que les applications $x \mapsto \lambda_j(x)$ sont globalement définies sur $I\!R^n$ et qu'elles sont uniformément séparées du reste du spectre de $P_e(x)$ (cf. paragraphe 1.2). On note par Π_0 et $\Pi(x)$ les projecteurs spectraux correspondant respectivement à E_0 et $\{\lambda_1(x), \ldots, \lambda_m(x)\}$.

On s'intéressera aussi à la situation plus générale suivante : soient $E_1 < \ldots < E_r$ des valeurs propres du spectre discret de P^a, chaque E_j étant de multiplicité m_j. Pour chaque j, on suppose qu'il existe exactement m_j "courbes" $\lambda_{j1}(x), \ldots, \lambda_{jm_j}(x)$ de valeurs propres de $P_e(x)$ qui converge vers E_j lorsque $|x|$ tend vers l'infini. Elles seront aussi globalement définies sur $I\!R^n$ et séparées du reste du spectre de $P_e(x)$. Dans ce cas, Π_0 désignera le projecteur spectral de P^a associé à $\{E_1, \ldots, E_r\}$ et $\Pi(x)$ celui de $P_e(x)$ associé à $\{\lambda_{jl}(x), \, 1 \leq j \leq r, \, 1 \leq l \leq m_j\}$.

On introduit la partie adiabatique de P :

$$P^{AD} = \Pi P \Pi,$$

les opérateurs d'ondes :

$$\Omega_{\pm}^{AD} = s - \lim_{t \to \pm\infty} e^{itP^{AD}} e^{-itP_a} \Pi_0,$$

$$\Omega_{\pm}^{NAD} = s - \lim_{t \to \pm\infty} e^{itP} e^{-itP^{AD}} E_{ac}(P^{AD})$$

et l'opérateur de diffusion adiabatique :

$$S^{AD} = (\Omega_{+}^{AD})^* \Omega_{-}^{AD}.$$

L'objectif est d'approximer la diffusion des états précédents par une diffusion adiabatique associée à l'opérateur P^{AD}. Dans [KMW1], une approximation semi-classique des opérateurs d'onde de canal est notamment dégagée. Ce travail de thèse constitue un prolongement de [KMW1] de deux manières. Tout d'abord, on reprend certains résultats de [KMW1] mais sans supposer que la valeur propre E_0 soit simple, ou bien en considérant un opérateur P^{AD} obtenu après avoir projeté sur plusieurs sous-espaces propres de P^a. D'autre part, on s'est intéressé aux sections efficaces totales pour une direction d'incidence fixée et on a obtenu une approximation adiabatique pour certaines d'entre elles. Avant de donner un résumé détaillé du travail, citons des travaux, concernant les sections efficaces totales, sur lesquels on s'est appuyé : [Y] (1986), [RT] (1987), [RW] (1994), [W5] (1993), [I1] et [I2].

Résumé par partie :

La partie 1 est consacrée à l'étude de l'hamiltonien électonique $P_e(x)$ et à la construction de l'opérateur adiabatique P^{AD}. Les potentiels sont réguliers et à longue portée.
Au paragraphe 1.1, on ramène l'étude de l'opérateur d'énergie de la molécule diatomique à celle de l'opérateur P. Au paragraphe 1.2, on fait une hypothèse de stabilité (HS) sur une valeur propre E_0 du spectre discret de l'hamiltonien interne P^a et on établit quelques propriétés qui permettent de construire l'opérateur P^{AD}. Au paragraphe 1.3, on reprend la démarche mais pour des potentiels présentant des singularités coulombiennes.

Dans la partie 2, on établit par la méthode de Mourre (cf. [Mo]) des théorèmes d'absorption limite avec de "petits" poids pour les opérateurs P^{AD} et P avant d'étudier les opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{AD}$ et $\Omega_{\pm}^{NAD}$.
Au moyen de la méthode des commutateurs multiples (cf. [JMP]), on obtient, au paragraphe 2.1, l'existence et la régularité de la valeur au bord de la résolvante R^{AD} de l'opérateur P^{AD}, les potentiels étant réguliers et à longue portée (cf. [KMW1]). Dans les mêmes conditions, on montre, au paragraphe 2.2, que l'on peut contrôler la valeur au bord de la résolvante R de l'opérateur P avec de "petits" poids dans une certaine bande d'énergie. Précisément, pour une énergie E convenable (cf. théorème 2.2.6), il existe un voisinage $[a, b]$ de E, inclu dans le spectre continu de P et ne contenant pas de valeur propre de P, tel que l'on ait :

$$\forall s > \frac{1}{2},\ \exists C > 0;\ \sup_{\substack{\Re(z)\in[a,b] \\ \Im(z)\neq 0}} || < x >^{-s} (P - z)^{-1} < x >^{-s} || \leq C$$

(il s'agit de la variable $x \in I\!R^n$ précédente). Pour des potentiels à courte portée, on établit, au paragraphe 2.3, l'existence et la complétude des opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{AD}$ et $\Omega_{\pm}^{NAD}$, on détermine le spectre continu de l'opérateur P^{AD} (c'est $[E_0; +\infty[$) et on en déduit une information sur celui de l'opérateur P (cf. [KMW1]). En présence de singularités coulombiennes, on vérifie au paragraphe 2.4 que la plupart des résultats de cette partie 2 persistent. En particulier, on propose une preuve de l'existence des opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{NAD}$, différente de celle de [KMW1]. Au paragraphe 2.5, on introduit la situation plus générale évoquée plus haut, où l'on considére plusieurs valeurs propres du spectre discret de l'opérateur P^a. Avec une hypothèse de stabilité adéquate, on peut encore construire un opérateur adiabatique P^{AD} qui vérifie les propriétés des parties 1 et 2 (sauf 1.3 et 2.4), lorsque les potentiels sont réguliers.

La partie 3 introduit diverses sections efficaces totales pour une direction d'incidence fixée et fournit des résultats d'existence dans une certaine bande d'énergie. Les potentiels sont réguliers et décroissent plus vite que $< x >^{-(n+1)/2}$ à l'infini.
Afin de définir les sections efficaces totales et de suivre leur dépendance en h, on reprend au paragraphe 3.1 la formulation géométrique d'Agmon (cf. [A]) pour les systèmes à N-corps. Au paragraphe 3.2, on définit, pour chaque direction d'incidence, les sections efficaces totales de l'opérateur P comme des distributions en énergie (cf. [ES], [RW], [W5]) ainsi que des sections efficaces totales adiabatiques associées à l'opérateur P^{AD}. Au paragraphe 3.3, on montre, pour ces opérateurs P et P^{AD}, l'existence des sections efficaces totales correspondantes σ_α et σ_α^{AD}, obtenue en sommant sur tous les canaux de sorties et issue d'un canal particulier α, de décomposition a. Pour certains canaux de sortie β, on établit au paragraphe 3.4 l'existence des sections efficaces totales $\sigma_{\beta\alpha}$ du canal α vers ces canaux β ainsi que certaines sections efficaces totales adiabatiques $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$. Pour ces sections $\sigma_{\beta\alpha}$, on justifie le calcul formel de [RW] qui fait le lien entre cette définition des sections efficaces totales et celle basée sur l'amplitude de diffusion.

Dans la partie 4, on commence l'étude semi-classique du système par celle des résolvantes des opérateurs P^{AD} et P. Les potentiels sont réguliers et à longue portée (sauf indication contraire).
Le paragraphe 4.1 reprend les propriétés de la partie 1 mais avec un contrôle en h (cf. [KMW1]). Au paragraphe 4.2, on reprend les résultats de [KMW1] qui permettent d'approximer semi-classiquement la résolvante de l'opérateur P par celle de l'opérateur P^{AD}, lorsque cette dernière est contrôlée semi-classiquement et les potentiels sont à courte portée. Au paragraphe 4.3, on contrôle semi-classiquement la résolvante de l'opérateur P^{AD} en s'inspirant de la technique de la fonction fuite globale de [GM], généralisant le résultat de [KMW1] au cas où E_0 est dégénérée. Sous une hypothèse de non-capture sur l'énergie E, on obtient donc :

$$\forall s > \frac{1}{2},\ || < x >^{-s} (P^{AD} - (\lambda \pm i0))^{-1} < x >^{-s} || = O(h^{-1}),$$

uniformément pour λ assez proche de E. Si la valeur propre E_0 est l'état fondamental de l'opérateur $P^a(0)$ (en particulier, elle est simple) alors, pour une énergie E dans une certaine bande d'énergie et satisfaisant une hypothèse de non-capture, on obtient l'estimation suivante :

$$\forall s > \frac{1}{2},\ || < x >^{-s} (P - (\lambda \pm i0))^{-1} < x >^{-s} || = O(h^{-1}),$$

uniformément pour λ assez proche de E. Ici les potentiels sont à longue portée à la différence de [KMW1], où ils étaient à courte portée pour ce même résultat. En considérant les premières valeurs propres de $P^a(0)$, qui sont dans le spectre discret : $E_1, \dots E_r$, on montre au paragraphe 4.4 que l'on peut encore estimer semi-classiquement les résolvantes des opérateurs P^{AD} et P. Si chaque valeur propre E_j vérifie une hyphothèse de"non-croisement" (NC), on a encore les estimations précédentes pour P^{AD} et P (dans une certaine bande d'énergie dans le second cas), toujours pour des potentiels à longue portée. S'ils sont à courte portée, on en déduit, grâce à [KMW1], que l'on a dans les conditions précédentes l'approximation suivante :

$$\forall s > \frac{1}{2},\ || < x >^{-s} [(P - (\lambda \pm i0))^{-1} - (P^{AD} - (\lambda \pm i0))^{-1}] < x >^{-s} || = O(1),$$

uniformément pour λ assez proche de E. En suivant [KMW1], on obtient l'approximation de Born-Oppenheimer des opérateurs d'onde de canal de [KMW1] dans cette situation plus générale. Le paragraphe 4.5 est une digression dans laquelle on applique les techniques précédentes à un opérateur de Schrödinger matriciel et à l'opérateur de Dirac. Dans ce dernier cas, on étend un résultat de [Ce]. En effet, en notant par D l'opérateur de Dirac avec champ électrique scalaire V, régulier et à longue portée, on a :

$$\forall s > \frac{1}{2}, \; || < x >^{-s} (D - (\lambda \pm i0)I_4)^{-1} < x >^{-s} || = O(h^{-1})$$

uniformément pour λ assez proche de λ_0, une énergie non-captive pour l'hamiltonien $< \xi > +V(x)$ vérifiant :

$$\lambda_0 > \left(\sup_{x \in \mathbb{R}^3} V(x) \right) - 1.$$

La partie 5 traite de l'étude semi-classique des sections efficaces totales associées à P, introduites dans la partie 3.
Le paragraphe 5.1 regroupe les résultats d'approximation de certaines sections efficaces totales par leur équivalent adiabatique et des conséquences sur les autres sections. Pour une certaine bande d'énergie I, non-captive pour des hamiltoniens classiques, et sous l'hypothèse de "non-croisement" (NC), on obtient l'estimation :

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = O(h^\tau)$$

uniformément pour $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$, où la constante τ dépend de la décroissance des potentiels à l'infini. De plus, il existe un $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) - \sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) = O(h^{\tau+1+\epsilon_0}),$$

uniformément pour $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$. Pour certains canaux de sorties β, qualifiés d'"adiabatiques", on a :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h) - \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda, \omega; h) = O(h^{\tau+1+\epsilon_0}).$$

Pour les autres canaux de sorties β, si la section efficace totale $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h)$ existe, alors on a :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h) = O(h^{\tau+1+\epsilon_0})$$

(ceci concerne par exemple des canaux associés à une décomposition différente de a). Les deux résultats d'approximation sont respectivement démontrés aux paragraphes 5.2 et 5.3. Au paragraphe 5.4, on dégage un terme dominant pour la section efficace totale σ_α et on montre qu'il est produit par la diffusion élastique $\sigma_{\alpha\alpha}$.

Enfin, on a regroupé dans une annexe la preuve de résultats élémentaires. Cette annexe contient également tout ou partie de preuves fastidieuses. A chaque partie correspond une partie dans l'annexe.

Perspectives :

Dans ce travail de thèse, deux types de résultats sont dégagés, lorsque l'on peut construire un opérateur adiabatique P^{AD} associé à l'hamiltonien quantique P. D'une part, ce dernier possède des propriétés structurelles qui sont rassemblés dans la parties 1, 2 et 3. D'autre part, le comportement semi-classique de cet opérateur P est bien décrit par l'approximation de Born-Oppenheimer, comme on le voit dans les parties 4 et 5. Dans diverses directions, on peut probablement aller plus loin. Indiquons quelques perspectives possibles.

Dans la partie 2, on contrôle la valeur au bord de la résolvante de P avec de "petits" poids, près de certaines énergies. Comme cela est précisé dans la remarque 2.2.8, certains seuils de l'opérateur ne sont pas explicitement exclus. Ce fait suggère que le théorème d'absorption limite de [PSS] reste valable près de certains seuils, ceux-ci dépendant de la structure de l'opérateur (cf. l'hypothèse de stabilité). Ce phénomène se reproduit au niveau des sections efficaces totales, qui seraient continues près de ces seuils.

Au paragraphe 2.5, on montre que l'on peut construire un opérateur adiabatique P^{AD} en considérant plusieurs valeurs propres de l'hamiltonien interne P^a, ayant des propriétés analogues. A ce sujet, on peut espérer retrouver dans cette situation les résultats du paragraphe 2.4, où des singularités coulombiennes sont permises.

Dans la partie 4, on donne une version "matricielle" de la méthode de [GM] pour construire un opérateur conjugué. Il semble indispensable de disposer d'une fonction fuite globale, commune aux différents hamiltoniens classiques (cf. la preuve de la proposition 4.3.4). On récupère ainsi un contrôle semi-classique de la valeur au bord de la résolvante de P, sous des hypothèses de non-capture et de "non-croisement". Que se passe-t-il au niveau de la diffusion si des "courbes" électroniques se croisent ou seulement se touchent ? La réponse ne semble pas simple puisque la littérature ne fournit que des réponses partielles (cf. [Ha2], [HJ], [MN], [Me], [Ma3]). Quant à l'hypothèse de non-capture, elle semble nécessaire pour obtenir le contrôle semi-classique de la résolvante de P^{AD} (cf. [W4]). A cet égard, signalons que, même s'il n'y a pas explicitement d'hypothèse de non-capture dans [Kar], les pacquets d'onde restent localisés près de trajectoires classiques non-captives, tout au long de leur évolution.

Dans la partie 5, des techniques connues permettent d'approximer des sections efficaces totales par leur équivalent adiabatique, moyennant des hypothèses de non-capture et de "non-croisement". Intuitivement, on peut s'attendre à ce que ces approximations soient encore valables sans les deux hypothèses précédentes. Il semble difficile d'éviter l'hypothèse de non-capture car elle intervient au niveau du contrôle semi-classique des résolvantes. Le rôle des croisements devrait se situer dans l'importance relative des différentes sections efficaces totales, comme l'incitent à penser les probabilités de transitions obtenues dans [HJ]. Par ailleurs, on peut espérer être plus précis dans l'estimation des sections efficaces totales $\sigma_{\beta\alpha}$ pour $b \neq a$ (cf. [W5]).

L'approximation de Born-Oppenheimer, qui a fait ses preuves expérimentalement, s'avère être un outil théorique utile pour affronter la complexité des systèmes à N-corps. Une meilleure connaissance des limites de cette approximation devrait également éclairer les sciences expérimentales qui l'utilisent.

1 Hamiltonien électronique et opérateurs adiabatiques.

Dans cette partie, on va introduire des notations et dégager, grâce à une hypothèse de stabilité sur E_0, des propritétés de l'hamiltonien électronique $P_e(x)$. On détaillera la preuve de [CDS] selon laquelle l'opérateur P^{AD}, défini dans l'introduction, est auto-adjoint sur un domaine que l'on précisera. On supposera dans un premier temps que les potentiels sont réguliers et, au paragraphe 1.3, on reprendra ces propriétés en présence de singularités coulombiennes. On travaillera à h fixé et on omettra d'indiquer la dépendance en h des différents objets.

1.1 Retrait du centre de masse.

Comme on l'a indiqué dans l'introduction, on s'intéresse à l'opérateur d'énergie d'une molécule diatomique à N électrons :

$$H = -\frac{1}{2m_1}\Delta_{x_1} - \frac{1}{2m_2}\Delta_{x_2} + \sum_{j=3}^{N+2}(-\frac{1}{2})\Delta_{x_j} + \sum_{l<j} V_{lj}(x_l - x_j),$$

où les noyaux, de masse respective m_1 et m_2, sont repérés par $x_1, x_2 \in I\!R^n$ et les électrons par les $x_j \in I\!R^n$, pour $j \in < 3, N+2 >$ (on a fixé leur masse à 1 ainsi que la constante de Planck). Pour tout (l,j), la fonction $V_{lj} : I\!R^n \longrightarrow I\!R$ représente l'interaction entre les particules l et j.

Dans l'étude physique d'un système de particules en interaction, il importe surtout de déterminer le mouvement des particules les unes par rapport aux autres. C'est pourquoi l'on ne tient pas compte du mouvement du centre de masse. On effectue donc un changement de variables de façon à isoler ce mouvement. Comme, de plus, on s'intéresse à une répartition en deux amas de ces particules, chaque amas contenant un noyau, on choisit des coordonnées de Jacobi d'amas ("Clustered Jacobi coordinates", cf. [RS1]) avec, dans chaque amas, des coordonées atomiques par rapport au noyau.

Soit $a = (A_1, A_2)$ une décomposition de $< 1, N+2 >$ en deux amas telle que $j \in A_j$, pour $j \in \{1,2\}$. On effectue le changement de variables suivant :

$$(x_j)_{1\leq j\leq N+2} \in I\!R^{n(N+2)} \mapsto (R, x, y) \in I\!R^n \times I\!R^n \times I\!R^{nN}$$

défini par :

$$\begin{cases} R &= \frac{1}{m_1+m_2+N}\left(m_1x_1 + m_2x_2 + \sum\limits_{j=3}^{N+2} x_j\right), \\ y_j &= x_j - x_k, \qquad\qquad k \in \{1,2\},\ j \in A_k' \equiv A_k \setminus \{k\}, \\ x &= \frac{1}{M_1}\left(m_1x_1 + \sum\limits_{j\in A_1'} x_j\right) - \frac{1}{M_2}\left(m_2x_2 + \sum\limits_{j\in A_2'} x_j\right), \quad M_k = m_k + |A_k'|,\ k \in \{1,2\}. \end{cases}$$

L'opérateur H devient dans ce système de coordonnées :

$$-\frac{1}{2(m_1+m_2+N)}\Delta_R - h^2\Delta_x + P^a + I_a$$

avec $h = \left(\frac{1}{2M_1}+\frac{1}{2M_2}\right)^{1/2}$, :

$$P^a = \sum_{k=1}^{2}\left[\sum_{j\in A'_k}(-\frac{1}{2}\Delta_{y_j} + V_{kj}(y_j)) - \frac{1}{2m_k}\sum_{l,j\in A'_k}\nabla_{y_l}\cdot\nabla_{y_j} + \frac{1}{2}\sum_{l,j\in A'_k}V_{lj}(y_l-y_j)\right] \quad (1.1;1)$$

et :

$$\begin{aligned} I_a \;=\; & \sum_{l\in A'_1, j\in A'_2} V_{lj}(y_l-y_j+x+f_2-f_1) + \textstyle\sum_{l\in A'_1} V_{l2}(x-f_1+f_2-y_l) \\ & + \sum_{j\in A'_2} V_{1j}(x-f_1+f_2-y_j) + V_{12}(x-f_1+f_2), \end{aligned} \quad (1.1;2)$$

où $f_k = \frac{1}{M_k}\sum_{j\in A'_k} y_j$ pour $k\in\{1,2\}$. Pour $l<j$, on a posé $V_{jl}(z)=V_{lj}(-z)$. On note par HE le terme de Hughes-Eckart :

$$HE \equiv -\sum_{k=1}^{2}\frac{1}{2m_k}\sum_{l,j\in A'_k}\nabla_{y_l}\cdot\nabla_{y_j}. \quad (1.1;3)$$

On laisse donc de côté $-\frac{1}{2(m_1+m_2+N)}\Delta_R$, l'énergie cinétique du centre de masse, et on s'intéresse à l'opérateur :

$$P = -h^2\Delta_x + P^a + I_a$$

agissant dans $L^2(I\!R^{n(N+1)})$. On notera par $P_e(x)$ (ou bien $P_e(x;h)$ pour signaler la dépendance en h) l'opérateur $P^a+I_a(x,\cdot)$ considéré comme agissant dans $L^2(I\!R^{nN}_y)$ et par P_e (ou $P_e(h)$) ce même opérateur considéré comme agissant dans $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$. On l'appelle l'hamiltonien électronique : l'énergie cinétique des noyaux a été enlevée. On a :

$$P = -h^2\Delta_x + P_e. \quad (1.1;4)$$

On notera par P_a l'opérateur obtenu à partir de P en négligeant le potentiel inter-amas I_a. On a donc :

$$P_a = -h^2\Delta_x + P^a. \quad (1.1;5)$$

On impose aux interactions V_{lj} de vérifier l'hypothèse (D_ρ) suivante, pour un réel $\rho>0$:

$$\left\{\begin{array}{c} \forall 1\le l,j\le N+2,\quad V_{lj}\in C^\infty(I\!R^n;I\!R) \text{ et} \\ \\ \exists\rho>0;\ \forall\alpha\in I\!N^n,\ \exists C_\alpha>0;\ \forall x\in I\!R^n,\quad |\partial_x^\alpha V_{lj}(x)|\le C_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}\ . \end{array}\right\}(D_\rho)$$

où l'on a noté par $< x >$ la quantité $(1+|x|^2)^{1/2}$.

Comme ces fonctions V_{lj} sont bornées, on peut appliquer à H le théorème de Kato (cf. [RS1]). L'opérateur H est donc auto-adjoint de domaine $H^2(I\!R^{n(N+2)})$, l'espace de Sobolev des fonctions $f \in L^2(I\!R^{n(N+2)})$ telles que leur laplacien au sens des distributions appartienne aussi à $L^2(I\!R^{n(N+2)})$. De même, l'opérateur P est auto-adjoint sur $H^2(I\!R^{n(N+1)})$ et l'opérateur P^a est auto-adjoint sur $\mathcal{D}(P^a) \equiv H^2(I\!R_y^{nN})$.

1.2 Hypothèse de stabilité et opérateurs adiabatiques.

Au moyen d'une hypothèse de stabilité faite sur $E_0 \in \sigma_{disc}(P^a)$, on peut construire l'opérateur $\Pi(x)$ évoqué dans l'introduction. On étudie ici la régularité de la fonction $x \in I\!R^n \mapsto \Pi(x) \in \mathcal{L}(L^2(I\!R_y^{nN}))$ et son comportement à l'infini. On définit les parties adiabatique et non-adiabatique de P par :

$$P^{AD} = \Pi P \Pi,\ Q^{AD} = \hat{\Pi} P \hat{\Pi},\ (\hat{\Pi} \equiv 1 - \Pi).$$

On va voir dans ce paragraphe que les opérateurs P^{AD} et Q^{AD} sont auto-adjoints sur un domaine convenable. On s'intéresse également à l'opérateur $A^{AD} \equiv \Pi A \Pi$, où A est le générateur des dilatations relatives à la variable x :

$$A = \frac{x \cdot \nabla_x + \nabla_x \cdot x}{2i}.$$

Il jouera le rôle d'opérateur conjugué au sens de Mourre dans les estimations de résolvante (cf. partie 2).

Selon l'intuition physique, l'hamiltonien électronique doit se scinder en la somme des hamiltoniens internes à chaque amas lorsque la distance entre les centres de masse de ces amas devient infinie, puisqu'alors l'interaction inter-amas disparaît. Cette intuition est illustrée dans la :

Proposition 1.2.1. *([Ra], [KMW1]) Sous l'hypothèse (D_ρ) avec $\rho > 0$, on a, au sens de la convergence forte dans $L^2(I\!R_y^{nN})$ des résolvantes :*

$$\lim_{|x|\to\infty} P_e(x) = P^a.$$

Démonstration : Voir l'annexe A. $\square$

Considérons maintenant $E_0 \in \sigma_{disc}(P^a)$ une valeur propre de P^a de multiplicité m. D'après la théorie générale relative à la convergence forte au sens généralisé (cf. [K]), la proposition 1.2.1 implique qu'il existe, pour $|x|$ assez grand, des éléments $\lambda(x)$ de $\sigma(P_e(x))$, convergeant vers E_0, lorsque $|x| \to \infty$. De plus, la multiplicité totale de ces points est supérieure ou égale à m. Si, de surcroît, on impose à E_0 d'être "loin" du spectre essentiel de $P_e(x)$ pour $|x|$ assez grand, en supposant qu'elle vérifie la propriété suivante :

$$\exists \delta > 0,\ \exists R > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ |x| \geq R \Longrightarrow d(E_0, \sigma_{ess}(P_e(x))) \geq \delta,$$

on est alors sûr qu'il existe au moins m valeurs propres de $P_e(x)$, chacune répétée autant que sa multiplicité, convergeant vers E_0 lorsque $|x| \to \infty$.

Dans toute la suite, on impose à E_0 l'**hypothèse de stabilité** (HS) suivante : il y a exactement m "courbes" de valeurs propres de $P_e(x)$, que l'on note $\lambda_1(x),\ldots,\lambda_m(x)$, chacune répétée autant que sa multiplicité, qui convergent vers E_0 lorsque $|x|\to\infty$. De plus, on suppose que les applications $x\mapsto\lambda_j(x)\in\sigma(P_e(x))$ sont globalement définies sur $I\!R^n$, et que, pour un réel $\delta>0$, la condition (H_δ) suivante :

$$\forall x\in I\!R^n,\ d(\{\lambda_1(x),\ldots,\lambda_m(x)\},\sigma(P_e(x))\setminus\{\lambda_1(x),\ldots,\lambda_m(x)\})\geq\delta. \qquad (H_\delta)$$

soit vérifiée. Sous cette hypothèse, on a en fait $\lambda_j(x)\in\sigma_{disc}(P_e(x))$, pour tout j et tout x. On note par Π_0 le projecteur spectral de P^a associé à E_0 et, pour tout $x\in I\!R^n$, par $\Pi(x)$ celui de $P_e(x)$ associé à $\{\lambda_1(x),\ldots,\lambda_m(x)\}$.

Remarque 1.2.2. *Notons que rien n'assure que les opérateurs bornés $\Pi(x)$ et $I_a(x)$ commutent. En revanche, $\Pi(x)$, commme fonction de $P_e(x)$, commute évidemment avec ce dernier.*

Tout d'abord, considérons la régularité de l'application $x\in I\!R^n\mapsto\Pi(x)\in\mathcal{L}(L^2(I\!R^{nN}_y))$. La proposition suivante établit qu'elle est de classe C^∞ sous l'hypothèse (D_ρ) avec $\rho>0$. Notons qu'elle est encore de classe C^2 si les potentiels présentent des singularités coulombiennes (cf. [CDS] et le paragraphe 1.3).

Proposition 1.2.3. *Sous l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho>0$, l'application $x\in I\!R^n\mapsto\Pi(x)\in\mathcal{L}(L^2(I\!R^{nN}_y))$ est de classe C^∞.*

Démonstration : D'après la condition (D_ρ), l'application $x\mapsto P_e(x)$ est continue en norme des résolvantes et d'après l'hypothèse (H_δ), il existe, pour tout $x_0\in I\!R^n$, un voisinage V_0 de x_0 tel que, pour tout $x\in V_0$, on ait :

$$\Pi(x)=\frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma(x_0)}(z-P_e(x))^{-1}dz$$

où $\Gamma(x_0)$ est un arc C^1, fermé, entourant les $\lambda_j(x)$, pour $x\in V_0$, et tel qu'il existe un $\eta>0$ tel que :

$$\forall x\in V_0,\ d(\sigma(P_e(x)),\Gamma(x_0))\geq\eta.$$

Grâce à la condition (D_ρ), l'application $x\in V_0\mapsto(z-P_e(x))^{-1}$ est C^∞, pour $z\in\Gamma(x_0)$. Il en est donc de même de l'application $x\in V_0\mapsto\Pi(x)$. $\square$

Intéressons-nous maintenant au comportement de cette fonction à l'infini. D'après la proposition 1.2.1, on s'attend à ce qu'elle tende vers Π_0. Nous allons voir qu'il en est bien ainsi et que ce résultat repose sur la **décroissance exponentielle des fonctions propres associées à** E_0.

D'après le théorème HVZ (cf. [RS3] ou bien [CFKS]), le spectre essentiel de P^a est un intervalle $[E^a,+\infty[$. Appartenant au spectre discret, la valeur propre E_0 est donc strictement inférieure à la borne inférieure de ce spectre essentiel. On peut donc appliquer les travaux d'Agmon (cf. [A]) qui assurent la décroissance exponentielle des fonctions propres associées à E_0. Il existe donc un $s_0>0$ tel que :

$$0<s\leq s_0\implies\forall\phi\in Im\Pi_0,\ e^{s<y>}\phi(y)\in L^2(I\!R^{nN}_y). \qquad (1.2;1)$$

Remarquons que s_0 est uniforme sur $Im\Pi_0$ car $dim(Im\Pi_0) < \infty$. A l'aide de cette propriété, on peut décrire le comportement de $\Pi(x)$ à l'infini par la :

Proposition 1.2.4. *([KMW1]) Sous l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > 0$, on a les estimations suivantes :*

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||\partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},$$

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x)\Pi_0|| + ||(\partial_x^\alpha I_a)(x)\Pi(x)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},$$

et :

$$||\Pi(x)P_e(x)\Pi(x) - E_0\Pi(x)|| = O(< x >^{-\rho}),$$

où $||\cdot||$ désigne la norme de $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_y^{nN}))$.

Démonstration : La preuve est renvoyée à celle de la proposition 4.1.2 (cf. l'annexe D), où les mêmes estimations seront démontrées avec une uniformité par rapport au paramètre h. $\square$

Remarque 1.2.5. *De ces résultats sur la fonction $x \mapsto \Pi(x)$, on en déduit des propriétés de l'opérateur Π défini par :*

$$\Pi = \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \Pi(x)dx$$

et agissant dans $L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{n(N+1)})$ (cf. [RS4], p. 281). Ainsi, sous l'hypothèse (D_ρ) avec $\rho > 0$ et pour tout $\alpha \in \mathbb{N}^n$, les opérateurs suivants :

$$< x >^{\rho+|\alpha|}\ \partial_x^\alpha(\Pi - \Pi_0),\ < x >^{\rho}\ (\Pi P_e \Pi - E_0\Pi),$$

$$< x >^{\rho+|\alpha|}\ (\partial_x^\alpha I_a)\Pi,\ < x >^{\rho+|\alpha|}\ (\partial_x^\alpha I_a)\Pi_0$$

sont bornés sur $L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{n(N+1)})$.
On a noté par $\partial_x^\alpha(\Pi - \Pi_0)$ l'opérateur :

$$\int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)dx.$$

Remarque 1.2.6. *On a d'autres propriétés de Π qui proviennent du fait que, pour chaque x, $\Pi(x)$ est une projection orthogonale :*

$$\Pi\hat{\Pi} = \hat{\Pi}\Pi = 0,\ \Pi(\nabla_x\Pi) = (\nabla_x\Pi)\hat{\Pi}$$

où $\hat{\Pi} = 1 - \Pi$.

La première égalité est claire, vérifions le seconde. Comme $\Pi(x)^2 - \Pi(x) = 0$, on obtient la relation :

$$0 = \Pi(x)(\nabla_x(\Pi(x)^2 - \Pi(x)))\Pi(x) = \Pi(x)(\nabla_x\Pi)(x)\Pi(x).$$

On a une identité semblable avec $\hat{\Pi}$, donc :

$$\begin{array}{rcccl} \Pi(x)(\nabla_x\Pi)(x) & = & \Pi(x)(\nabla_x\Pi)(x)(\Pi(x) + \hat{\Pi}(x)) & = & \Pi(x)(\nabla_x\Pi)(x)\hat{\Pi}(x), \\ & = & (\Pi(x) + \hat{\Pi}(x))(\nabla_x\Pi)(x)\hat{\Pi}(x) & = & (\nabla_x\Pi)(x)\hat{\Pi}(x). \end{array}$$

Par construction, les opérateurs Π_0 et $\Pi(x)$ sont de rang fini dans $L^2(I\!R_y^{nN})$. Ainsi la compacité des opérateurs $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}$ et $< x >^{-\mu} \nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1}$, considérés comme agissant sur les seules variables $x \in I\!R^n$, (cf. [RS2]), se transmet à des opérateurs agissant sur les variables $(x, y) \in I\!R^{n(N+1)}$. C'est l'objet du :

Lemme 1.2.7. *Pour $\mu > 0$, les opérateurs de $\mathcal{L}(L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)}))$:*

$$< x >^{-\mu} \Pi_0(-\Delta_x + i)^{-1},\ < x >^{-\mu} \Pi(-\Delta_x + i)^{-1}$$

et les opérateurs de $\mathcal{L}(L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)}); (L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)}))^n)$

$$< x >^{-\mu} \Pi_0\nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1},\ < x >^{-\mu} \Pi\nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1},$$

sont compacts.

Démonstration : voir l'annexe A. □

On considère maintenant les opérateurs adiabatiques et on montre qu'ils admettent une réalisation auto-adjointe :

Proposition 1.2.8. *([CDS]) Sous l'hypothèse (D_ρ), $\rho > 0$, les opérateurs P^{AD}, Q^{AD} et A^{AD} de domaines respectifs $\mathcal{D}(P^{AD}) = \Pi\mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi}L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$, $\mathcal{D}(Q^{AD}) = \hat{\Pi}\mathcal{D}(P) \oplus \Pi L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$ et $\mathcal{D}(A^{AD}) = \Pi\mathcal{D}(A) \oplus \hat{\Pi}L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$ sont auto-adjoints et essentiellement auto-adjoints sur l'espace de Schwartz $\mathcal{S} = \mathcal{S}(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$.*

Remarque 1.2.9. *A cause des projecteurs Π et $\hat{\Pi}$, chacun de ses opérateurs admet 0 pour valeur propre.*

Démonstration : On reprend les arguments de [CDS]. Soit $V = P - P^{AD} - Q^{AD}$ (avec $Q^{AD} = \hat{\Pi}P\hat{\Pi}$). Comme $\hat{\Pi}P_e\Pi = \hat{\Pi}\Pi P_e\Pi = 0$, on a :

$$V = -(\Pi\Delta_x\hat{\Pi} + \hat{\Pi}\Delta_x\Pi) = -2(\Pi(\nabla_x\hat{\Pi}) + \hat{\Pi}(\nabla_x\Pi)) \cdot \nabla_x + (\Pi(\Delta_x\hat{\Pi}) + \hat{\Pi}(\Delta_x\Pi)).$$

Soit $P^0 = -\Delta_x - \Delta_y + HE$ (où HE désigne le terme de Hughes-Eckart, (cf. (1.1 ;3)). D'après la proposition 1.2.4, V est P^0-borné de borne relative 0 et comme $P - P^0$ est $P-$borné, V est $P-$borné de borne relative 0. Par conséquent, $P^{AD} + Q^{AD}$ est auto-ajoint sur $\mathcal{D}(P)$ et $\mathcal{S}$ est un coeur pour $P^{AD} + Q^{AD}$ (cf. [RS2]).

Comme P^{AD} est symétrique, il suffit de vérifier que $Im(P^{AD} \pm i) = L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$ et que $(P^{AD} \pm i)\mathcal{S}$ est dense dans $L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$ (cf. [RS1]).

L'opérateur $P^{AD} + Q^{AD}$ étant auto-adjoint, pour $\phi \in L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$, il existe $\theta_\pm \in \mathcal{D}(P)$ tels que :

$$\Pi\phi = (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_\pm.$$

On a donc :

$$(P^{AD} \pm i)(\Pi\theta_\pm + (\mp i)\hat{\Pi}\phi) = \Pi(P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_\pm + (\pm i)(\mp i)\hat{\Pi}\phi = \phi.$$

Soient maintenant $\phi \in L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$ et $\epsilon > 0$. Comme $\mathcal{S}$ est un coeur pour $P^{AD} + Q^{AD}$, il existe $\theta_\pm \in \mathcal{S}$ tels que :

$$||\Pi\phi - (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_\pm|| < \frac{\epsilon}{2}$$

et par densité, il existe $\tilde{\phi} \in \mathcal{S}$ tel que : $||\tilde{\phi} - \phi|| < \epsilon/2$. D'après la proposition 1.2.4, $\Pi\theta_\pm + (\mp i)\hat{\Pi}\tilde{\phi} \in \mathcal{S}$. De plus, on a :

$$||\phi - (P^{AD} \pm i)(\Pi\theta_\pm + (\mp i)\hat{\Pi}\tilde{\phi})|| \leq ||\Pi||\, ||\Pi\phi - (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_\pm|| + ||\hat{\Pi}||\, ||\tilde{\phi} - \phi|| < \epsilon.$$

Les opérateurs Π et $\hat{\Pi}$ jouant le même rôle, Q^{AD} est aussi auto-adjoint sur le domaine annoncé. Comme $\hat{\Pi}A\Pi + \Pi A\hat{\Pi} = -i(\hat{\Pi}x \cdot (\nabla_x \Pi) + \Pi x \cdot (\nabla_x \hat{\Pi}))$ est borné et comme $\mathcal{S}$ est un coeur pour A, on montre de même le résultat pour A^{AD}. $\square$

Corollaire 1.2.10. *On a les propriétés suivantes :*

$$\begin{array}{rcccl} \Pi\mathcal{D}(P^{AD}) & = & \Pi\mathcal{D}(P) & \subset & \mathcal{D}(P), \\ \Pi\mathcal{D}(A^{AD}) & = & \Pi\mathcal{D}(A) & \subset & \mathcal{D}(A), \\ \Pi\mathcal{D}(\Pi(-\Delta_x)\Pi) & = & \Pi\mathcal{D}(-\Delta_x) & \subset & \mathcal{D}(-\Delta_x). \end{array}$$

En particulier, les domaines de P^{AD} et A^{AD} sont donnés par :

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{D}(P^{AD}) & = & \{\phi \in L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y});\ \Pi\phi \in \mathcal{D}(P)\}, \\ \mathcal{D}(A^{AD}) & = & \{\phi \in L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y});\ \Pi\phi \in \mathcal{D}(A)\}. \end{array}$$

Démonstration : Comme Π est un projecteur orthogonal, la proposition 1.2.8 donne les égalités. D'après la proposition 1.2.4, on a, pour $\phi \in \mathcal{S}$:

$$||P\Pi(P+i)^{-1}\phi|| = ||(\Pi(-\Delta_x) - 2(\nabla_x\Pi)\cdot\nabla_x - (\Delta_x\Pi) + \Pi P_e)(P+i)^{-1}\phi|| \leq C||\phi||.$$

L'opérateur $P\Pi(P+i)^{-1}$ est donc borné sur $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$, d'où $\Pi\mathcal{D}(P) \subset \mathcal{D}(P)$. De manière analogue, on obtient les autres égalités et inclusions. $\square$

Signalons aussi des propriétés de compacité :

Lemme 1.2.11. *Pour $\mu > 0$, les opérateurs*

$$< x >^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1},\ < x >^{-\mu} \nabla_x\Pi(P^{AD} + i)^{-1},$$

$$< x >^{-\mu} \Pi(P + i)^{-1},\ < x >^{-\mu} \nabla_x\Pi(P + i)^{-1}$$

sont compacts.

Démonstration : voir l'annexe A. $\square$

1.3 Singularités coulombiennes.

Dans les paragraphes 1.1 et 1.2, on a supposé que les potentiels sont réguliers. En fait, les résultats persistent sous des hypothèses moins restrictives (cf. [KMW1]). En particulier, pour $n \geq 3$, des singularités coulombiennes sont permises. On utilisera ces résultats au paragraphe 2.4.

A la place de l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > 0$, faisons l'hypothèse suivante (une seule singularité en 0) :

$$\left.\begin{cases} \forall 1 \leq l, j \leq N+2,\ V_{lj} \in C^\infty(I\!\!R^n \setminus \{0\}; I\!\!R), \quad V_{lj} \text{ est } \Delta-\text{compact et} \\ \\ \forall \alpha \in I\!\!N^n,\ \exists C_\alpha > 0; \forall x \in I\!\!R^n, |x| \geq 1 \Longrightarrow \quad |\partial_x^\alpha V_{lj}(x)| \leq C_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}, \end{cases}\right\} (S_\rho)$$

où Δ désigne le laplacien dans $I\!\!R^n$. D'après [KMW1] et [CDS], la plupart des résultats sont conservés à condition de restreindre le nombre de dérivation : $|\alpha| \leq 2$. On a cependant, une modification concernant le potentiel I_a.

Sous l'hypothèse (S_ρ), $\rho > 0$, l'opérateur P est encore auto-adjoint dans $L^2(I\!\!R^{n(N+1)})$, de domaine $H^2(I\!\!R^{n(N+1)})$. La proposition 1.2.1 reste valable avec quelques modifications dans la preuve. On a donc la :

Proposition 1.3.1. *([KMW1]) Sous l'hypothèse (S_ρ) avec $\rho > 0$, les opérateurs $I_a(x)(P^a + i)^{-1}$ converge fortement vers 0 dans $\mathcal{L}(L^2(I\!\!R_y^{nN}))$, lorsque $|x| \to \infty$, et on a, au sens de la convergence forte des résolvantes :*

$$\lim_{|x|\to\infty} P_e(x) = P^a.$$

Démonstration : Vérifions d'abord que l'opérateur $I_a(x)(P^a + i)^{-1}$ est uniformément borné en x. Pour chaque potentiel $V(x + L(y))$ constituant $I_a(x)$, avec $L \in \mathcal{L}(I\!\!R^{nN}, I\!\!R^n)$ surjective, on peut construire une transformation unitaire $T(x) \in \mathcal{L}(L^2(I\!\!R_y^{nN}))$ telle que :

$$V(x + L(\cdot)) = T(x)V(L(\cdot))T(x)^{-1}$$

et qui commute avec le laplacien Δ_y de $I\!\!R_y^{nN}$. Comme V est $-\Delta$-borné de borne relative 0 et L est surjective, $V(L(\cdot))$ est $-\Delta_y$-borné de borne relative 0 et il en est de même de $V(x + L(\cdot))$. L'opérateur $I_a(x)(P^a + i)^{-1}$ est donc bien uniformément borné en x.

Comme $(P_e(x) + i)^{-1}$ est lui aussi uniformément borné en x (par l'inverse de la distance de i à l'axe réel), il suffit de montrer que, pour $\phi \in \mathcal{S}(I\!\!R_y^{nN})$, on a :

$$\lim_{|x|\to\infty} I_a(x)(P^a + i)^{-1}\phi = 0.$$

Soit $\chi \in C_0^\infty(I\!\!R^n)$ telle que $\chi = 1$ sur la boule unité. On note par I_a^χ (respectivement $I_a^{1-\chi}$) le potentiel issu de I_a en remplaçant chaque potentiel V par χV (respectivement $(1-\chi)V$). D'après la preuve de la proposition 1.2.1, on a

$$\lim_{|x|\to\infty} I_a^{1-\chi}(x)(P^a + i)^{-1}\phi = 0,\ \forall \phi \in \mathcal{S}(I\!\!R_y^{nN}).$$

Prenons $V(x+L(\cdot))$ un potentiel constituant I_a. On a, pour tout $\phi \in \mathcal{S}(I\!R_y^{nN})$:

$$(\chi V)(x+L(\cdot))(P^a+i)^{-1} = V(x+L(\cdot))(-\Delta_y+i)^{-1}\,(-\Delta_y+i)\chi(x+L(\cdot))(P^a+i)^{-1}\phi$$

où $V(x+L(\cdot))(-\Delta_y+i)^{-1}$ est uniformément borné. Comme $\nabla_y(P^a+i)^{-1}$ et $\Delta_y(P^a+i)^{-1}$ sont bornés et comme χ est à support compact, on voit que ce terme tend vers 0 lorsque $|x| \to \infty$. $\square$

On considère maintenant la régularité de l'application $x \mapsto \Pi(x)$. On va voir que l'on peut reprendre les arguments de [CDS] et montrer la proposition :

Proposition 1.3.2. *([CDS]) Sous l'hypothèse (S_ρ) pour $\rho > 0$, l'application $x \in I\!R^n \mapsto \Pi(x) \in \mathcal{L}(L^2(I\!R_y^{nN}))$ est de classe C^2.*

Démonstration : La preuve est basée sur l'astuce suivante, due à [CDS] : soit y_j l'une des variables de $y \in I\!R^{nN} \simeq (I\!R^n)^N$ et soit $V(x+L(\cdot))$ l'un des potentiels constituant I_a, alors l'opérateur :

$$(P_e(x)+i)^{-1}(\partial^\alpha V)(x+L(\cdot))(P_e(x)+i)^{-1}, \text{ pour } |\alpha| = 1,$$

est égal à :

$$(P_e(x)+i)^{-1}[\partial_{y_j}^\alpha, V(x+L(\cdot))](P_e(x)+i)^{-1} \tag{1.3;1}$$

à une constante multiplicative près ne dépendant pas de x. Grâce à ce point de vue, on montre que $x \mapsto (P_e(x)+i)^{-1}$ est de classe C^2. De plus, $\partial^\alpha(P_e(x)+i)^{-1}$, pour $|\alpha| = 1$, est constitué de termes du type (1.3 ;1) et, pour $|\alpha| = 2$, de termes de la forme :

$$(P_e(x)+i)^{-1}[\partial_{y_j}^\beta, V(x+L(\cdot))](P_e(x)+i)^{-1}[\partial_{y_j}^\gamma, \tilde{V}(x+L(\cdot))](P_e(x)+i)^{-1}$$

et de la forme :

$$(P_e(x)+i)^{-1}[\partial_{y_j}^\beta, [\partial_{y_j}^\gamma, V(x+L(\cdot))]](P_e(x)+i)^{-1},$$

pour $\beta+\gamma = \alpha$, $|\beta| = |\gamma| = 1$. Les détails de ces propriétés sont renvoyés dans l'annexe A.

D'après la relation qui relie $\Pi(x)$ à la résolvante de $P_e(x)$:

$$\Pi(x) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma(x)} (z - P_e(x))^{-1} dz,$$

(cf. (4.1 ;5)), on en déduit le résultat. $\square$

Remarque 1.3.3. *Notons, au passage, que les mêmes arguments permettent d'affirmer que les applications suivantes :*

$$\begin{aligned} x &\mapsto (P_e(x)+i)^{-1} I_a(x)(P^a+i)^{-1}, \\ x &\mapsto (P_e(x)+i)^{-1} I_a(x)(P_e(x)+i)^{-1} \end{aligned}$$

sont aussi de classe C^2 et que leurs dérivées sont données par la formule de Leibnitz (cf. l'annexe A).

Passons maintenant au comportement à l'infini. Les estimations de la proposition 1.2.4 restent valables à condition de dériver au plus deux fois et "d'encadrer" le potentiel I_a par deux projecteurs. On commence par étudier les dérivées de I_a :

Proposition 1.3.4. *Sous l'hypothèse* (S_ρ) *pour* $\rho > 0$*, on a l'estimation suivante. Pour tout* $\alpha \in \mathbb{N}^n$ *tel que* $|\alpha| \leq 2$*, il existe* $D_\alpha > 0$ *tel que, pour tout* $x \in \mathbb{R}^n$*, on ait :*

$$||\Pi_0(\partial_x^\alpha I_a)(x)\Pi_0|| + ||\Pi_0(\partial_x^\alpha I_a)(x)\Pi(x)|| + ||\Pi(x)(\partial_x^\alpha I_a)(x)\Pi(x)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|} .$$

On a noté par $||\cdot||$ *la norme de* $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_y^{nN}))$.

Démonstration : On décompose I_a comme dans la preuve de la proposition 1.3.1. Comme les potentiels constituant $I_a^{1-\chi}$ vérifient l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > 0$, on peut reprendre le raisonnement de la preuve de la proposition 1.2.1. Grâce à la décroissance exponentielle des fonctions propres de $Im\Pi_0$, on en déduit l'estimation :

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a^{1-\chi})(x)\Pi_0|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|} .$$

Considérons maintenant I_a^χ. Grâce à la formule (4.1 ;3), on voit que $\Pi_0 V(x + L(\cdot))$ est uniformément borné. En suivant le raisonnement de la preuve de la proposition 1.3.1, en utilisant la décroissance exponentielle précédente et s'appuyant sur le fait que χ est à support compact, on obtient :

$$||\chi(x + L(\cdot))\Pi_0|| \leq C < x >^{-\rho} \tag{1.3;2}$$

et l'estimation :

$$||\Pi_0 I_a^\chi(x)\Pi_0|| = O(< x >^{-\rho}).$$

On peut vérifier que les opérateurs $\partial_y^\alpha(P^a + i)^{-1}$ avec $|\alpha| = 1$ sont bornés de l'espace à poids $L_\delta^2(\mathbb{R}_y^{nN})$ dans lui-même pour tout δ et qu'il en est de même pour $\partial_y^\alpha(P^a + i)^{-1}\partial_y^\beta$ si $|\alpha| + |\beta| = 2$ et $\delta \geq 0$ (cf. annexe A).

Ainsi l'estimation (1.3 ;2) est encore valable en remplaçant Π_0 par $\partial_y^\alpha\Pi_0$ pour $|\alpha| = 1$ et ρ par $\rho + 1$ (il s'agit ici de la composition de ∂_y^α avec Π_0). On en déduit que la norme de l'opérateur :

$$\Pi_0[\partial^\alpha(\chi V)](x + L(\cdot))\Pi_0 = \Pi_0[\partial_{y_j}^\alpha, (\chi V)(x + L(\cdot))]\Pi_0$$

est $O(< x >^{-\rho-1})$. Pour $|\alpha| = 2$, l'opérateur précédent s'écrit :

$$\Pi_0[\partial_{y_j}^\beta, [\partial_{y_j}^\gamma, (\chi V)(x + L(\cdot))]]\Pi_0$$

avec $|\beta| = |\gamma| = 1$. Pour les termes contenant $\partial_y^\alpha\Pi_0$ ou $\Pi_0\partial_y^\alpha$, l'argument précédent s'applique car ces opérateurs sont bornés sur $L_{\rho+2}^2(\mathbb{R}_y^{nN})$. La norme du terme restant est majorée par :

$$||\Pi_0\partial_{y_j}^\beta| - \Delta_y|^{1/2}||\ ||(-\Delta_y + 1)^{-1/2}V(x + L(\cdot))(-\Delta_y + 1)^{-1/2}||\ ||\nabla_y\chi(x + L(\cdot))\partial_{y_j}^\gamma\Pi_0||,$$

donc par :

$$C(||(\nabla\chi)(x+L(\cdot))\partial_{y_j}^{\gamma}\Pi_0||+||\chi(x+L(\cdot))\nabla_y\partial_{y_j}^{\gamma}\Pi_0||)\leq C^{'}<x>^{-\rho-2}.$$

On a donc :

$$||\Pi_0(\partial_x^{\alpha}I_a^{\chi})(x)\Pi_0||=O(<x>^{-\rho-|\alpha|}).$$

Comme les opérateurs $\partial_y^{\alpha}(P_e(x)+i)^{-1}$ avec $|\alpha|=1$ (respectivement $\partial_y^{\alpha}(P_e(x)+i)^{-1}\partial_y^{\beta}$ avec $|\alpha|+|\beta|=2$) se comportent comme $\partial_y^{\alpha}(P^a+i)^{-1}$ (respectivement $\partial_y^{\alpha}(P^a+i)^{-1}\partial_y^{\beta}$) sur les espaces à poids $L^2_{\delta}(I\!R_y^{nN})$ (cf. annexe A), on montre de même que :

$$||\Pi_0(\partial_x^{\alpha}I_a)(x)\Pi(x)||+||\Pi(x)(\partial_x^{\alpha}I_a)(x)\Pi(x)||=O(<x>^{-\rho-|\alpha|}).\quad\square$$

A partir de cette proposition 1.3.4, on peut établir les autres estimations de la proposition 1.2.4 ainsi qu'une autre estimation qui sera utile au paragraphe 2.4.

Proposition 1.3.5. *Sous l'hypothèse (S_ρ) pour $\rho>0$, on a les estimations suivantes. Pour tout $\alpha\in I\!N^n$ tel que $|\alpha|\leq 2$, il existe $D_\alpha>0$ tel que, pour tout $x\in I\!R^n$, on ait :*

$$||\partial_x^{\alpha}(\Pi(x)-\Pi_0)||\leq D_\alpha<x>^{-\rho-|\alpha|}.$$

Pour tout $x\in I\!R^n$, on a :

$$||\Pi(x)P_e(x)\Pi(x)-E_0\Pi(x)||=O(<x>^{-\rho}).$$

Pour $|\alpha|=|\beta|=1$, il existe $D_{\alpha\beta}>0$ tel que, pour tout $x\in I\!R^n$, on ait :

$$||\Pi(x)(\partial_x^{\alpha}\Pi)(x)(\partial_x^{\beta}I_a)(x)\Pi(x)||\leq D_{\alpha\beta}<x>^{-\rho-2}.$$

On a noté par $||\cdot||$ la norme de $\mathcal{L}(L^2(I\!R_y^{nN}))$. Les deux premières estimations sont dues à [KMW1].

Démonstration : Pour les deux premières estimations, on suit la preuve de la proposition 4.1.2 en oubliant la dépendance en h (cf. l'annexe D). Grâce à la remarque 1.3.3, les arguments de la preuve de la proposition 1.3.4 permettent d'obtenir, pour tout $|\alpha|\leq 2$, l'existence d'un $D_\alpha>0$ tel que, pour tout $x\in I\!R^n$, on ait :

$$||\partial_x^{\alpha}(\Pi(x)-\Pi_0)\Pi_0||\leq D_\alpha<x>^{-\rho-|\alpha|}.$$

Au moyen de ce résultat, on peut reprendre à l'identique la preuve de cette proposition 4.1.2. Pour établir la dernière estimation, on remarque que l'opérateur $\Pi(x)I_a(x)\Pi(x)$ est donné par :

$$-\frac{1}{4\pi^2}\int_{\Gamma(x)}\int_{\Gamma(x)}(z-P_e(x))^{-1}I_a(x)(z^{'}-P_e(x))^{-1}dzdz^{'}$$

(avec les notations du paragraphe 4.1). D'après la remarque 1.3.3, il est donc de classe C^2 (car, localement et au voisinage de l'infini, on peut remplacer $\Gamma(x)$ par un contour fixe) et ses dérivées s'obtiennent par la formule de Leibnitz. De plus, les arguments utilisés dans la preuve de la proposition 1.3.4 permettent d'obtenir que les termes intervenant dans les dérivées secondes sont majorés par $C < x >^{-\rho-2}$. Parmi eux se trouve le terme :

$$-\frac{1}{4\pi^2}\int_{\Gamma(x)}\int_{\Gamma(x)}[\partial_x^\alpha(z-P_e(x))^{-1}](\partial_x^\beta I_a)(x)(z^{'}-P_e(x))^{-1}dzdz^{'}$$

qui n'est autre que $(\partial_x^\alpha \Pi)(x)(\partial_x^\beta I_a)(x)\Pi(x)$. $\square$

Compte tenu des propriétés que l'on vient d'établir, on voit que les autres résultats du paragraphe 1.2, sont encore valables en présence d'une singularité coulombienne (sauf peut-être le fait que $\mathcal{S}$ soit un coeur pour P^{AD} et A^{AD}).

2 Méthode de Mourre et opérateurs d'onde à h fixé.

La puissante méthode du commutateur de Mourre a permis dans de nombreux cas d'obtenir des théorèmes d'absorption limite (cf. [Mo], [JMP]). Par cette méthode, on va obtenir de tels théorèmes pour P^{AD} et P mais avec des poids particuliers : ils ne contiennent pas toutes les variables. Ce type de résultat a été obtenu dans [Ra] pour P^{AD} seulement. On pourra ensuite en déduire une preuve de l'existence et la complétude des opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{AD}$ et $\Omega_\pm^{NAD}$ ([Ra]). Dans le paragraphe 2.4, on reprendra l'étude de ces opérateurs d'onde lorsque les potentiels ont une singularité coulombienne. Dans ces quatres premiers paragraphes, on suppose que E_0 vérifie l'hypothèse de stabilité (HS) du paragraphe 1.2. Enfin, dans le paragraphe 2.5, on généralise les résultats au cas où plusieurs valeurs propres de P^a vérifient cette hypothèse de stabilité (HS).

2.1 Valeur au bord de la résolvante de P^{AD}.

Comme les opérateurs $\Pi(x)$ projettent sur des états propres de l'hamiltonien électronique $P_e(x)$, il n'est pas très surprenant que des poids $< x >^{-s}$, avec $s > 1/2$, suffisent pour définir la valeur au bord de R^{AD}, la résolvante de P^{AD}.

On se propose d'appliquer la méthode des commutateurs multiples (cf. [JMP]) aux opérateurs P^{AD} et $A^{AD} \equiv \Pi A \Pi$, où :

$$A = \frac{x \cdot \nabla_x + \nabla_x \cdot x}{2i}$$

est le générateur des dilatations en la variable x seulement. On établit d'abord quelques propriétés.

Proposition 2.1.1. *La forme symétrique $i[P^{AD}, A^{AD}]$ définie pour $\phi, \psi \in \mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$ par :*

$$\begin{aligned} < \psi, i[P^{AD}, A^{AD}]\phi > &= < P^{AD}\psi, iA^{AD}\phi > - < A^{AD}\psi, iP^{AD}\phi >, \\ &= < P^{AD}\psi, iA^{AD}\phi > + < iA^{AD}\psi, P^{AD}\phi >, \end{aligned}$$

est bornée inférieurement et fermable. L'opérateur auto-adjoint $i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ$ associé à sa fermeture vérifie :

$$\mathcal{D}(P^{AD}) \subset \mathcal{D}(i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ) \qquad (2.1;1)$$

et, pour tout $\phi \in \mathcal{D}(P^{AD})$, on a :

$$i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ\phi = 2\Pi(-\Delta_x)\Pi\phi - \Pi(-\Delta_x)x \cdot (\nabla_x\Pi)\Pi\phi - \Pi x \cdot (\nabla_x\Pi)(-\Delta_x)\Pi\phi - \Pi x \cdot (\nabla_x I_a)\Pi\phi. \qquad (2.1;2)$$

Remarque 2.1.2. *D'après la propriété (2.1;1), l'opérateur fermé $i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ(P^{AD} + i)^{-1}$ est défini partout donc borné sur $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$. Notons de plus que l'opérateur $\Pi(-\Delta_x)x \cdot (\nabla_x\Pi)\Pi$ est en fait d'ordre 1, d'après la remarque 1.2.6.*

Démonstration : (de la proposition) on utilise essentiellement les propriétés de régularité et la décroissance des dérivées de la fonction $x \mapsto \Pi(x)$ (cf. propositions 1.2.3 et 1.2.4), des résultats de compacité (cf. lemme 1.2.11) et la remarque 1.2.6. Voir l'annexe B. $\square$

Corollaire 2.1.3. *Pour $z \in \mathbb{C}\setminus \mathbb{R}$, on a : $(P^{AD}-z)^{-1}\mathcal{D}(A^{AD}) \subset \mathcal{D}(A^{AD})$. Pour $|\lambda|$ assez grand, λ réel, on a $(A^{AD}+i\lambda)^{-1}\mathcal{D}(P^{AD}) \subset \mathcal{D}(P^{AD})$ et $(P^{AD}+i)i\lambda(A^{AD}+i\lambda)^{-1}(P^{AD}+i)^{-1}$ converge fortement vers 1 lorsque $|\lambda| \to \infty$.*

Démonstration : voir l'annexe B. $\square$

On s'intéresse maintenant aux commutateurs itérés. On note :

$$\begin{array}{rcl} [P^{AD}, A^{AD}]_0^\circ & = & P^{AD} \\ [P^{AD}, A^{AD}]_k & = & [[P^{AD}, A^{AD}]_{k-1}, A^{AD}], \quad k \geq 1. \end{array}$$

D'après la proposition 1.2.3, ces commutateurs sont bien définis sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n_x; L^2(\mathbb{R}^{nN}_y))$.

Proposition 2.1.4. *Pour tout $k \in \mathbb{N}^*$, la forme $i^k[[P^{AD}, A^{AD}]_{k-1}^\circ, A^{AD}]$ définie sur $\mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$ est bornée inférieurement et est fermable. Le domaine de $i^k[P^{AD}, A^{AD}]_k^\circ$, l'opérateur auto-adjoint associé à sa fermeture, contient $\mathcal{D}(P^{AD})$. De plus, cet opérateur s'écrit sur $\mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$:*

$$\begin{array}{rcl} [P^{AD}, A^{AD}]_k^\circ & = & 2^k\Pi(-\Delta_x)\Pi + \Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+1}\Pi \\ & + & \Pi\mathcal{P}_{k+1} \cdot \nabla_x\Pi + \Pi\mathcal{Q}_{k+1}\Pi \end{array}$$

où les composantes du vecteur $\mathcal{P}_k$ sont de la forme :

$$\sum_{l=1}^{k} \sum_{\substack{|\alpha| \leq k \\ \alpha \in \mathbb{N}^l}} a_{\alpha l}(\partial_x^{\alpha_1}\Pi)\dots(\partial_x^{\alpha_l}\Pi)$$

et les $a_{\alpha l}$ sont des polynômes en x de degré total $\leq |\alpha|$, où $\mathcal{Q}_k$ est une somme de termes du type :

$$\sum_{l=1}^{k} \sum_{\substack{|\alpha| \leq k \\ \alpha \in \mathbb{N}^l}} b_{\alpha l}(\partial_x^{\alpha_1}A_1)\dots(\partial_x^{\alpha_l}A_l)$$

avec $A_j = \Pi$ ou I_a, et les $b_{\alpha l}$ sont des polynômes en x de degré total $\leq |\alpha|$.

Démonstration : On procède par récurrence. Pour $k = 1$, tout a été démontré dans la proposition 2.1.1 ((2.1 ;2) prend la forme convenable lorsque l'on exploite la remarque 2.1.2). Supposons la propriété vraie pour k. On effectue les calculs sur $\mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$. On a :

$$[\Pi\mathcal{Q}_{k+1}\Pi, \Pi A\Pi] = \Pi[\mathcal{Q}_{k+1}, A]\Pi + \Pi[\Pi, A]\mathcal{Q}_{k+1}\Pi + \Pi\mathcal{Q}_{k+1}[\Pi, A]\Pi.$$

Ces termes contribuent à $\Pi\mathcal{Q}_{k+2}\Pi$. D'après la preuve de la proposition 2.1.1, $2^k[\Pi(-\Delta_x)\Pi, \Pi A\Pi]$ s'écrit :

$$2^{k+1}\Pi(-\Delta_x)\Pi - 2^k(\Pi(-\Delta_x)x \cdot (\nabla_x\Pi)\Pi + \Pi x \cdot (\nabla_x\Pi)(-\Delta_x)\Pi)$$

et les deux derniers termes contribuent à :

$$\Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+2}\Pi + \Pi\mathcal{P}_{k+2} \cdot \nabla_x\Pi$$

(cf. remarque 2.1.2). D'autre part, on a :

$$\begin{aligned}[\Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+1}\Pi, \Pi A\Pi] &= \Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+1}[\Pi, A]\Pi + \Pi[\Pi, A]\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+1}\Pi \\ &+ \Pi[\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+1}, A]\Pi.\end{aligned}$$

Le premier terme se retrouve dans $\Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+2}\Pi$, le deuxième, qui vaut :

$$\Pi\nabla_x \cdot ([\Pi, A]\mathcal{P}_{k+1}\Pi) + \Pi[[\Pi, A], \nabla_x]\mathcal{P}_{k+1}\Pi,$$

se répartit entre $\Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+2}\Pi$ et $\Pi\mathcal{Q}_{k+2}\Pi$. Le troisième se transforme en :

$$\Pi\nabla_x \cdot [\mathcal{P}_{k+1}, A]\Pi + \Pi[\nabla_x, A] \cdot \mathcal{P}_{k+1}\Pi,$$

avec $[\nabla_x, A] = -i\nabla_x$, et intervient donc dans $\Pi\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{k+2}\Pi$. La contribution du terme symétrique $\Pi\mathcal{P}_{k+1} \cdot \nabla_x\Pi$ se traite de manière analogue.

D'après la proposition 1.2.4 et le lemme 1.2.11, il existe donc un opérateur K_{k+1}, $P^{AD}-$compact, tel que la forme $i^k[[P^{AD}, A^{AD}]_k^\circ, A^{AD}]$ soit représentée sur $\mathcal{D}(P^{AD})\cap\mathcal{D}(A^{AD})$ par l'opérateur suivant :

$$2^{k+1}\Pi(-\Delta_x)\Pi + K_{k+1}.$$

Cet opérateur est auto-adjoint sur $\mathcal{D}(\Pi(-\Delta_x)\Pi) = \mathcal{D}(P^{AD})$ et est borné inférieurement. La forme considérée est donc elle aussi bornée inférieurement, fermable et on a : $\mathcal{D}(P^{AD}) \subset \mathcal{D}(i^k[P^{AD}, A^{AD}]_k^\circ)$. $\square$

La condition la plus importante pour appliquer la méthode de Mourre est l'estimation de Mourre (cf. [Mo]), que nous allons établir près d'un point $E \notin \{E_0, 0\}$.

Proposition 2.1.5. *Soit ϵ le signe de la différence $E - E_0$. Il existe $\alpha, \delta > 0$ et un opérateur compact K tels que :*

$$\chi(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ\chi(P^{AD}) \geq \alpha\chi(P^{AD}) + \chi(P^{AD})K\chi(P^{AD}),$$

où $\chi = \mathbb{1}_{]E-\delta,E+\delta[}$, la fonction caractéristique de l'intervalle $]E - \delta, E + \delta[$.

Démonstration : Soit $\delta > 0$ tel que $\delta < |E - E_0|$ et $\delta < |E|$. On pose $\chi = \mathbb{1}_{]E-\delta,E+\delta[}$. D'après (2.1 ;2), on a :

$$\chi(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ\chi(P^{AD}) = 2\epsilon\chi(P^{AD})\Pi(-\Delta_x)\Pi\chi(P^{AD}) + \chi(P^{AD})K_1\chi(P^{AD}),$$

où K_1 est un opérateur compact (cf. la preuve de la proposition 2.1.1). Comme $0 \notin supp\chi$, on a $\chi(P^{AD})\hat{\Pi} = \chi(0)\hat{\Pi} = 0$. On a, sur $Im(\chi(P^{AD})) \subset Im(\Pi)$:

$$\Pi(-\Delta_x)\Pi = P^{AD} - \Pi P_e\Pi = P^{AD} - E_0 - (\Pi P_e\Pi - E_0).$$

D'après la proposition 1.2.4 et le lemme 1.2.11, $\Pi P_e \Pi - E_0 \Pi$ est $P^{AD}-$compact. Il existe donc un opérateur compact K tel que :

$$\chi(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \chi(P^{AD}) = 2\epsilon\chi(P^{AD})(P^{AD} - E_0)\chi(P^{AD}) + \chi(P^{AD})K\chi(P^{AD}).$$

Enfin, on a, par le calcul fonctionnel :

$$\epsilon\chi(P^{AD})(P^{AD} - E_0)\chi(P^{AD}) \geq \epsilon(E - E_0 - \epsilon\delta)\chi(P^{AD})$$

avec $\epsilon(E - E_0 - \epsilon\delta) > 0$. $\square$

Notons par $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ l'espace à poids (en x seulement) :

$$L^2(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y); < x >^{2s} dx).$$

Grâce aux résultats précédents, on peut appliquer les résultats de [JMP] (P^{AD} est "infiniment lisse" par rapport à A^{AD}) et on a le :

Théorème 2.1.6. *Soit $E \notin \{E_0, 0\}$,*

1. *il existe $\delta > 0$ tel que le spectre ponctuel de P^{AD}, $\sigma_p(P^{AD})$, soit fini dans $]E-\delta, E+\delta[$.*
2. *Pour tout $E' \in]E - \delta, E + \delta[\cap \sigma_c(P^{AD})$, $E' \notin \sigma_p(P^{AD})$, il existe un voisinage $[a, b]$ de E' tel que :*

$$\forall s > \frac{1}{2}, \exists C > 0; \sup_{\substack{\Re(z)\in[a,b] \\ \Im(z)\neq 0}} || < x >^{-s} (P^{AD} - z)^{-1} < x >^{-s} || \leq C.$$

3. *De plus, sur $[a, b]$, la valeur au bord de la résolvante $R^{AD}(\lambda \pm i0)$ est bien définie comme opérateur de $\mathcal{L}(L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y)), L^2_{-s}(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y)))$, pour tout $s > 1/2$.*
4. *Pour tout $n \in I\!N$ et $s \in I\!R$ tels que $s > n + 1/2$, la fonction $\lambda \mapsto R^{AD}(\lambda \pm i0)$ est de classe C^n sur $[a, b]$ et on a :*

$$< x >^{-s} \frac{1}{n!}\partial^n_\lambda R^{AD}(\lambda \pm i0) < x >^{-s} = s - \lim_{\epsilon\to 0} < x >^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i\epsilon)^{-n-1} < x >^{-s} .$$

Démonstration : On utilise la méthode de Mourre, A^{AD} jouant le rôle d'opérateur conjugué. Notons que, pour $s \in [0, 1]$, l'opérateur $< A^{AD} >^s (P^{AD} + i)^{-1} < x >^{-s}$ est borné (cf. annexe B). Il suffit donc de prouver l'estimation avec les poids $< A^{AD} >^{-s}$ à la place de $< x >^{-s}$. On peut reprendre les arguments de [JMP] et on obtient le résultat. $\square$

Remarque 2.1.7. *L'absence de l'hypothèse (b) de [JMP] est compensée par le fait qu'on a étudié les formes $i^k[P^{AD}, A^{AD}]_k$ sur $\mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$ et par les propriétés du corollaire 2.1.3.*

Remarque 2.1.8. *Notons que le théorème 2.1.6 est valable pour $P_a\Pi_0 = (-\Delta_x + E_0)\Pi_0$ près de tout point $E \in]E_0; +\infty[\setminus\{0\}$. En effet, cet opérateur est $\infty-$lisse par rapport à $A\Pi_0$ et ces opérateurs sont conjugués près de tout point différent de E_0 et de 0.*

2.2 Théorème d'absorption limite pour la résolvante de P avec de "petits" poids.

On utilise de nouveau la méthode de Mourre avec $A^{AD} = \Pi A \Pi$ ($A = \frac{x\cdot\nabla_x + \nabla_x\cdot x}{2i}$) comme opérateur conjugué (sans considérer les commutateurs multiples). Comme pour P^{AD}, on établit une série de propriétés qui permettent d'appliquer la méthode de Mourre (cf. [Mo]).

Tout d'abord, la forme $i[P, A^{AD}]$, définie sur $\mathcal{D}(P)\cap\mathcal{D}(A^{AD})$, est représentée par l'opérateur symétrique suivant :

$$i[P,\Pi]A\Pi + i\Pi A[P,\Pi] + \Pi i[P,A]\Pi.$$

Or, on a :

$$\begin{cases} i[P,A] = i[-\Delta_x + P_e, A] &= i[-\Delta_x, A] + i[I_a, A] = -2\Delta_x - x\cdot(\nabla_x I_a), \\ [P,\Pi] = [-\Delta_x + P_e, \Pi] &= [-\Delta_x, \Pi] = -2(\nabla_x \Pi)\cdot\nabla_x - (\Delta_x \Pi), \end{cases}$$

donc, d'après la proposition 1.2.4, cet opérateur est $P-$borné. Comme il commute avec la conjugaison complexe, il admet une extension auto-adjointe (cf. le théorème de Von Neumann dans [RS2], p. 143). On en déduit que, sur $\mathcal{D}(P)\cap\mathcal{D}(A^{AD})$, la forme $i[P, A^{AD}]$ est représentée par un opérateur auto-adjoint, noté $i[P, A^{AD}]^\circ$, dont le domaine contient $\mathcal{D}(P)$. De manière analogue, la forme $i[[P, A^{AD}]^\circ, A^{AD}]$, définie sur $\mathcal{D}(P)\cap\mathcal{D}(A^{AD})$, est représentée par un opérateur auto-adjoint dont le domaine contient également $\mathcal{D}(P)$. Dans la preuve du corollaire 2.1.3, on peut remplacer P^{AD} par P. On montre ainsi la :

Proposition 2.2.1. *Pour $z \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$, on a : $(P-z)^{-1}\mathcal{D}(A^{AD}) \subset \mathcal{D}(A^{AD})$. Pour $|\lambda|$ assez grand, λ réel, on a $(A^{AD}+i\lambda)^{-1}\mathcal{D}(P)\subset\mathcal{D}(P)$ et $(P+i)i\lambda(A^{AD}+i\lambda)^{-1}(P+i)^{-1}$ converge fortement vers 1 lorque $|\lambda|\to\infty$.*

Remarque 2.2.2. *On notera que le point important dans l'hypothèse (c) de [Mo] est le fait que la forme $i[H,A]$ soit représentée sur $\mathcal{D}(H)\cap\mathcal{D}(A)$ par un opérateur auto-adjoint, dont le domaine contient $\mathcal{D}(H)$. De plus, la remarque 2.1.7 s'applique à P.*

Pour pouvoir appliquer la méthode de Mourre, il ne reste plus qu'à établir l'estimation de Mourre pour P et A^{AD}, près de $E \neq E_0$. On impose de plus la condition :

$$E \notin \sigma(Q^{AD}) \tag{2.2;1}$$

(en particulier on a $E \neq 0$). On se propose de déduire l'estimation de Mourre pour P de celle pour P^{AD}. L'hypothèse essentielle (2.2 ;1) est exploitée dans le :

Lemme 2.2.3. *Soit $\theta \in C_0^\infty(\mathbb{R};\mathbb{R})$ telle que :*

$$supp\theta \cap \sigma(Q^{AD}) = \emptyset.$$

L'opérateur $\theta(P) - \theta(P^{AD})$ est compact.

Remarque 2.2.4. *La preuve de ce lemme est essentiellement la même que celle du lemme 4.3 de [KMW1].*

Démonstration : Pour expliciter $\theta(P)$ et $\theta(P^{AD})$, on utilise le calcul fonctionnel de Helffer-Sjöstrand (cf. [HS]). H étant un opérateur auto-adjoint et $\theta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$, l'opérateur $\theta(H)$ est donné par :

$$\theta(H) = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z)(H-z)^{-1}L(dz),$$

où $L(dz)$ désigne la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{C}$. $\tilde{\theta}$ est une extension presque holomorphe, à support compact, de θ, c'est-à-dire qu'elle vérifie :

$$\begin{cases} \tilde{\theta} \in C_0^\infty(\mathbb{C}) \quad , \quad \tilde{\theta}_{|I\!R} = \theta \\ \\ \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z) \;=\; O(|\Im(z)|^\infty). \end{cases}$$

On écrit la formule des résolvantes pour P et $P^{AD} + Q^{AD}$ et pour $\Im(z) \neq 0$:

$$R(z) \equiv (P-z)^{-1} = (P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} - R(z)(\hat{\Pi}P\Pi + \Pi P\hat{\Pi})(P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1}.$$

D'après les propriétés de Π, on a les relations suivantes :

$$\begin{cases} \Pi(P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} \;=\; \Pi(P^{AD} - z)^{-1} \;=\; \Pi R^{AD}(z), \\ \hat{\Pi}(P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} \;=\; \hat{\Pi}(Q^{AD} - z)^{-1} \;=\; \hat{\Pi}\hat{R}(z), \end{cases}$$

(on a noté $\hat{R}(z) = (Q^{AD} - z)^{-1}$). Toujours pour $\Im(z) \neq 0$, la formule des résolvantes devient donc :

$$R(z) = R^{AD}(z)\Pi + \hat{R}(z)\hat{\Pi} - R(z)(\hat{\Pi}P\Pi R^{AD}(z) + \Pi P\hat{\Pi}\hat{R}(z)).$$

D'après l'hypothèse faite sur θ et le fait que $0 \in \sigma(Q^{AD})$, on a $\theta(P^{AD})\hat{\Pi} = \theta(0)\hat{\Pi} = 0$. On en déduit donc que :

$$\theta(P) - \theta(P^{AD}) = \theta(Q^{AD})\hat{\Pi} + \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z)B(z)L(dz),$$

avec :

$$B(z) = -R(z)(\hat{\Pi}P\Pi R^{AD}(z) + \Pi P\hat{\Pi}\hat{R}(z)).$$

Comme $supp\theta \cap \sigma(Q^{AD}) = \emptyset$ par hypothèse, on a $\theta(Q^{AD}) = 0$. En vertu du lemme 1.2.11, les opérateurs $R(z)\hat{\Pi}P\Pi R^{AD}(z)$ et $R(z)\Pi P\hat{\Pi}\hat{R}(z)$ sont compacts puisque l'on a :

$$\begin{array}{rcccl} \hat{\Pi}P\Pi & = & \hat{\Pi}(-\Delta_x)\Pi + \hat{\Pi}P_e\Pi & = & \hat{\Pi}(-\Delta_x)\Pi, \\ & = & -2\hat{\Pi}(\nabla_x\Pi)\cdot\nabla_x - \hat{\Pi}(\Delta_x\Pi) & = & \hat{\Pi}(2(\nabla_x\hat{\Pi}) + (\Delta_x\hat{\Pi})), \\ & = & (2(\nabla_x\hat{\Pi}) + (\Delta_x\hat{\Pi}))\Pi & & \text{(cf. remarque 1.2.6).} \end{array}$$

$B(z)$ est donc compact et vérifie, de plus, pour $\Im(z) \neq 0$ et $z \in supp\tilde{\theta}$:

$$||B(z)|| \leq C|\Im(z)|^{-2}$$

avec C indépendant de z. La convergence en norme de l'intégrale :

$$\frac{1}{\pi}\int_{|\Im(z)|\geq\epsilon} \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z)B(z)L(dz),$$

lorsque $\epsilon \to 0$, donne la compacité $\theta(P) - \theta(P^{AD})$. $\square$

On établit maintenant l'estimation de Mourre pour P :

Proposition 2.2.5. *On considère un réel E tel que $E \neq E_0$ et $E \notin \sigma(Q^{AD})$. Soit $\delta > 0$ vérifiant $|E - E_0| > \delta$ et $]E + \delta, E + \delta[\cap \sigma(Q^{AD}) = \emptyset$. Soit $\chi \in C_0^\infty(]E - \delta, E + \delta[; I\!R)$ valant 1 près de E. Il existe un réel $\alpha > 0$ et un opérateur compact K tels que :*

$$\chi(P)i[P, \epsilon A^{AD}]^\circ \chi(P) \geq \alpha \chi^2(P) + \chi(P)K\chi(P),$$

où ϵ est le signe de $E - E_0$.

Démonstration : Soit $\theta \in C_0^\infty(]E - \delta, E + \delta[; I\!R)$ telle que $\theta = 1$ sur le support de χ (donc $\theta\chi = \chi$). On a :

$$\begin{aligned}\theta(P)i[P, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) &= \theta(P)i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) \\ &\quad + \theta(P)(i[P, \Pi]\epsilon A^{AD} + i\epsilon A^{AD}[P, \Pi])\theta(P).\end{aligned}$$

Les opérateurs $\theta(P)[P, \Pi]$ et $A^{AD}\theta(P)$ sont respectivement compact (cf. lemme 1.2.11 et proposition 1.2.4) et borné (cf. proposition 2.2.1). D'autre part, on a :

$$\begin{aligned}\theta(P)i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) &= (\theta(P) - \theta(P^{AD}))i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) \\ &\quad + \theta(P)i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ (\theta(P) - \theta(P^{AD})) \\ &\quad + \theta(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P^{AD}).\end{aligned}$$

Comme $i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ$ est $P^{AD}-$borné, donc aussi $P-$borné, on en déduit, grâce au lemme 2.2.3, qu'il existe un opérateur compact K_1 tel que :

$$\theta(P)i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) = \theta(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P^{AD}) + K_1.$$

L'estimation de Mourre pour P^{AD} et A^{AD} près de E (cf. proposition 2.1.5) donne l'existence d'un réel $\alpha > 0$ et d'un opérateur compact K_2 tels que :

$$\theta(P^{AD})i[P^{AD}, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P^{AD}) \geq \alpha \theta^2(P^{AD}) + K_2.$$

Or, la différence :

$$\theta^2(P) - \theta^2(P^{AD}) = (\theta(P) - \theta(P^{AD}))\theta(P) + \theta(P^{AD})(\theta(P) - \theta(P^{AD}))$$

est compacte d'après le lemme 2.2.3. On obtient donc :

$$\theta(P)i[P, \epsilon A^{AD}]^\circ \theta(P) \geq \alpha \theta^2(P) + K$$

où K est un opérateur compact. En composant à gauche et à droite par $\chi(P)$, on obtient le résultat. $\square$

Comme pour P^{AD}, les propriétés précédentes permettent d'appliquer la méthode de Mourre (cf. [Mo]). On en déduit donc le théorème suivant :

Théorème 2.2.6. *Soit $E \neq E_0$ et $E \notin \sigma(Q^{AD})$,*

1. *il existe $\delta > 0$ tel que le spectre ponctuel de P, $\sigma_p(P)$, soit fini dans $]E - \delta, E + \delta[$.*

2. *Pour tout $E' \in]E-\delta, E+\delta[\cap\sigma_c(P)$, $E' \notin \sigma_p(P)$, il existe un voisinage $[a,b]$ de E' tel que :*

$$\forall s > \frac{1}{2}, \exists C > 0; \sup_{\substack{\Re(z)\in[a,b] \\ \Im(z)\neq 0}} || < x >^{-s} (P-z)^{-1} < x >^{-s} || \leq C.$$

3. *De plus, sur $[a,b]$, la valeur au bord de la résolvante $R(\lambda \pm i0)$ est bien définie comme opérateur de $\mathcal{L}(L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y)), L^2_{-s}(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y)))$, pour tout $s > 1/2$, et est une fonction continue de λ.*

On désigne par $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ l'espace des fonctions de $I\!R^n_x$ à valeurs dans $L^2(I\!R^{nN}_y)$, de carré intégrable pour la mesure $< x >^{2s} dx$.

Démonstration : cf. [Mo], [PSS]. $\square$

Remarque 2.2.7. *Contrairement aux théorèmes d'absorption limite habituels pour les hamiltonien à N corps, les poids ne contiennent pas toutes les variables. Cette légère amélioration n'est cependant établie que pour $E \notin \sigma(Q^{AD})$. Cette condition est remplie si, pour tout $x \in I\!R^n$, $\Pi(x)$ est le projecteur spectral de $P_e(x)$ sur ses m premières valeurs propres $\lambda_1(x), \ldots, \lambda_m(x)$ et si l'on a :*

$$E < \inf_{x\in I\!R^n} \inf \sigma(P_e(x)) \setminus \{\lambda_1(x), \ldots, \lambda_m(x)\}$$

puisqu'alors $Q^{AD} - E \geq c$ pour un certain réel $c > 0$. De plus, si E_0 vérifie l'inégalité précédente, alors le théorème d'absorption limite pour P est valable sur tout sous-intervalle compact de $]E_0; \inf\sigma(Q^{AD})[$ ne rencontant pas le spectre ponctuel de P, car le spectre continu de P contient l'intervalle $[E_0; +\infty[$ (cf. corollaire 2.3.8). Notons enfin que ce résultat est indépendant de h, il traduit une propriété structurelle de l'hamiltonien P.

Remarque 2.2.8. *Dans les conditions de la remarque 2.2.7 précédente, ce théorème 2.2.6 affirme que le théorème d'absorption limite est valable près d'une énergie :*

$$E \in]E_0; \inf\sigma(Q^{AD})[\setminus\sigma_p(P).$$

En particulier, une telle énergie E peut être un seuil de P. Ainsi, si l'intervalle $]E_0; \inf\sigma(Q^{AD})[$ contient des seuils de P qui ne sont pas des valeurs propres, le théorème d'absorption limite de [PSS], pour cet opérateur particulier, est encore valable près de ceux-ci.

2.3 Opérateurs d'onde et propriétés spectrales de P^{AD}.

L'approximation de Born-Oppenheimer consiste à remplacer l'opérateur P par sa partie adiabatique P^{AD}. Ainsi les opérateurs d'onde :

$$\Omega_\pm = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP} e^{-itP_a} \Pi_0,$$

associés à la décomposition a et à la valeur propre stable E_0 (cf. paragraphe 1.1 et 1.2), devraient être approximés, quand h est petit, par $\Omega_\pm^{AD}$. Pour confirmer ce point, on factorise $\Omega_\pm$ sous la forme :

$$\Omega_\pm = \Omega_\pm^{NAD}\Omega_\pm^{AD},$$

(cf. [Ra], [KMW1]).

Par rapport à l'article [KMW1], on réalise cette factorisation dans des conditions différentes (ici, les potentiels sont réguliers). On notera quelques différences dans les arguments, notamment pour l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$ (cf. proposition 2.3.4). Dans le paragraphe 2.4, on reprendra cette approche sous les hypothèses de [KMW1].

On suppose ici que les potentiels vérifient la propriété (D_ρ) pour $\rho > 1$, c'est-à-dire qu'ils sont réguliers et à courte portée. Ainsi, d'après [RS3] p 82, les opérateurs d'onde, associés à la décomposition a :

$$\Omega_\pm^a = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP}e^{-itP_a}E_{pp}(P^a)$$

existent. L'opérateur P^a est donné par (1.1 ;1), P_a par (1.1 ;5) et $E_{pp}(P^a)$ est la projection sur le sous-espace purement ponctuel de P^a. En particulier, on a l'existence des opérateurs d'onde :

$$\Omega_\pm = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP}e^{-itP_a}\Pi_0,$$

où Π_0 est défini au paragraphe 1.2. On s'intéresse à l'existence et à la complétude des opérateurs d'onde définis par :

$$\Omega_\pm^{AD} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP^{AD}}e^{-itP_a}\Pi_0,$$

$$\Omega_\pm^{NAD} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP}e^{-itP^{AD}}E_{ac}(P^{AD}),$$

respectivement, qui réalisent formellement la factorisation. On a utilisé les notations de la partie 1 et désigné par $E_{ac}(P^{AD})$ la projection sur le sous-espace absolument continu de P^{AD}.

La démarche consiste à exploiter la technique des commutateurs multiples pour P^{AD} (cf. proposition 2.1.4) en utilisant le lemme suivant :

Lemme 2.3.1. *([KMW1]) Pour tous $s, s', a, b \in I\!R$ tels que $0 < s' < s$, $ab > 0$ et $(a - E_0)(b - E_0) > 0$, pour toute fonction $f \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$ à support dans $[a, b] \setminus \sigma_p(P^{AD})$, il existe un réel $C > 0$ tel que :*

$$|| < x >^{-s} e^{-itP^{AD}} f(P^{AD}) < x >^{-s} || \leq C < t >^{-s'}, \ \forall t \in I\!R.$$

Démonstration : Grâce au 4. du théorème 2.1.6, il suffit d'appliquer le théorème 4.2. de [JMP] pour P^{AD}. $\square$

Commençons par étudier $\Omega_\pm^{AD}$. On a la :

Proposition 2.3.2. *([Ra], [KMW1]) Les opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{AD}$ existent et sont complets.*

Démonstration : La propriété $P^{AD}\hat{\Pi} = 0$ suggère que l'on a :

$$s - \lim_{t\to\pm\infty} \hat{\Pi} e^{itP^{AD}} e^{-itP_a} \Pi_0 = 0 \qquad (2.3;1)$$

(cf. [Ra]). Vérifions-le. Pour cela, il suffit de l'obtenir sur un sous-espace dense de $L^2(I\!R^{n(N+1)})$. Par le calcul fonctionnel, on a :

$$\hat{\Pi} e^{itP^{AD}} e^{-itP_a} \Pi_0 = \hat{\Pi} e^{-itP_a} \Pi_0 = -(\Pi - \Pi_0) e^{-it(-\Delta_x + E_0)} \Pi_0.$$

Or, l'opérateur $(\Pi - \Pi_0)\Pi_0(-\Delta_x + i)^{-1}$ est compact (cf. proposition 1.2.4 et lemme 1.2.7), on peut appliquer le lemme 2. de [RS3] p.24 et obtenir ainsi (2.3 ;1) sur le sous-espace dense $\mathcal{D}(-\Delta_x \Pi_0)$.

Prouvons maintenant que les limites :

$$s - \lim_{t\to\pm\infty} \Pi e^{itP^{AD}} e^{-itP_a} \Pi_0, \; s - \lim_{t\to\pm\infty} \Pi_0 e^{itP_a} e^{-itP^{AD}} \Pi$$

existent.

En calculant sur $\mathcal{S}(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$, on a :

$$\begin{array}{rcl} \Pi(P^{AD} - P_a)\Pi_0 & = & \Pi[-\Delta_x, \Pi]\Pi_0 + \Pi(\Pi P_e \Pi - E_0)\Pi_0 \\ & = & -2\Pi(\nabla_x \Pi) < x >^{\rho/2} \cdot < x >^{-\rho/2} \nabla_x \Pi_0 - \Pi(\Delta_x \Pi) < x >^{\rho/2} < x >^{-\rho/2} \Pi_0 \\ & + & \Pi(\Pi P_e \Pi - E_0) < x >^{\rho/2} < x >^{-\rho/2} \Pi_0. \end{array}$$

D'après la proposition 1.2.4, chaque terme est composé d'un premier facteur $P^{AD}-$borné et d'un second $(-\Delta_x \Pi_0)-$borné. Puisque $\rho > 1$, on voit que, grâce au 2. du théorème 2.1.6 et au théorème XIII.30 de [RS4] p 163, le premier facteur est $P^{AD}-$lisse sur tout intervalle compact ne contenant ni E_0 ni 0 et ne rencontrant pas le spectre ponctuel de P^{AD}. De même, le second facteur est $(-\Delta_x \Pi_0)-$lisse sur tout intervalle compact ne contenant pas 0, puisque l'on a l'équivalent du théorème 2.1.6 pour $(-\Delta_x \Pi_0)$ (cf. remarque 2.1.8). On peut donc reprendre la preuve du théorème XIII.31 de [RS4] p 164 et obtenir ainsi l'existence des deux limites en question.

Comme $\hat{\Pi} + \Pi = 1$, on a prouvé l'existence de $\Omega^{AD}_{\pm}$. On a donc automatiquement : $Im\Omega^{AD}_{\pm} \subset \mathcal{H}_{ac}(P^{AD})$, le sous-espace absolument continu de P^{AD}. Si, maintenant, on prend $\phi \in \mathcal{H}_{ac}(P^{AD})$ alors on a : $\Pi\phi = \phi$ et :

$$\phi = \Omega^{AD}_{\pm} \lim_{t\to\pm\infty} \Pi_0 e^{itP_a} e^{-itP^{AD}} \Pi\phi,$$

soit $\mathcal{H}_{ac}(P^{AD}) \subset Im\Omega^{AD}_{\pm}$, c'est-à-dire la complétude de $\Omega^{AD}_{\pm}$. $\square$

Remarque 2.3.3. *Dans [Ra] et [KMW1], la méthode est similaire. Ici, on a juste mis en avant la propriété (2.3 ;1), ce qui permet d'utiliser commodément la théorie des opérateurs lisses au sens de Kato. Notons que le raisonnement présenté ici reste valable sous la condition moins restrictive (2.7) de [KMW1] (cf. paragraphe 2.4).*

Grâce à la régularité de $\lambda \mapsto R^{AD}(\lambda \pm i0)$ (cf. 4. théorème 2.1.6) traduite dans le lemme 2.3.1, on est en mesure de prouver l'existence de $\Omega_{\pm}^{NAD}$.

En vue d'utiliser une méthode de Cook, on cherche à montrer que l'application :

$$t \mapsto e^{itP}(P - P^{AD})e^{-itP^{AD}}\phi$$

est intégrable, ϕ appartenant à un certain sous-espace dense (pour la norme de $L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$) de $\mathcal{H}_{ac}(P^{AD})$.

Comme $\mathcal{H}_{ac}(P^{AD}) \subset Im\Pi$, on a, sur $\mathcal{S}(I\!R_x^n; L^2(I\!R_y^{nN}))$:

$$(P - P^{AD})E_{ac}(P^{AD}) = \hat{\Pi}(-\Delta_x)\Pi E_{ac}(P^{AD}) = [-\Delta_x, \Pi]\Pi E_{ac}(P^{AD}).$$

Puisque $\nabla_x \Pi(P^{AD}+i)^{-1}$ et $(P^{AD}+i)^{-1}$ sont bornés sur les espaces à poids $L_s^2(I\!R_x^n; L^2(I\!R_y^{nN}))$ pour tout s (cf. l'annexe A), l'opérateur :

$$[-\Delta_x, \Pi]\Pi(P^{AD} + i)^{-1} < x >^{\rho+1} \tag{2.3;2}$$

est borné, d'après la proposition 1.2.4. L'ensemble :

$$\left\{ \begin{array}{c} f(P^{AD}) < x >^{\rho+1} \psi;\ \psi \in \mathcal{S}(I\!R_x^n; L^2(I\!R_y^{nN})),\ a, b \in I\!R,\ f \in C_0^\infty(I\!R; I\!R); \\ \\ ab > 0,\ (a - E_0)(b - E_0) > 0,\ supp f \subset [a, b] \setminus \sigma_p(P^{AD}) \end{array} \right\}$$

est dense dans $L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$, il suffit donc, pour établir l'existence de $\Omega_{\pm}^{NAD}$, d'utiliser le lemme 2.3.1, pour $1 < s^{'} < s = \rho + 1$. On a donc montré la :

Proposition 2.3.4. *([Ra], [KMW1]) Les opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{NAD}$ existent.*

Puisque l'on a l'existence de $\Omega_{\pm}^{AD}$ et de $\Omega_{\pm}^{NAD}$, on peut reconstruire $\Omega_{\pm}$ par la formule :

$$\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}^{NAD}\Omega_{\pm}^{AD},$$

ce qui implique en particulier : $Im\Omega_{\pm} \subset Im\Omega_{\pm}^{NAD}$. Cette inégalité peut-elle être stricte ? Non, à cause de la complétude de $\Omega_{\pm}^{AD}$. En effet, si $\phi = \Omega_{\pm}^{NAD}\psi$ avec $\psi \in \mathcal{H}_{ac}(P^{AD})$, alors il existe $\theta \in Im\Pi_0$ tel que $\psi = \Omega_{\pm}^{AD}\theta$ et donc, on a : $\phi = \Omega_{\pm}\theta$. Ce résultat constitue la :

Proposition 2.3.5. *([Ra], [KMW1]) Les opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{NAD}$ sont complets au sens suivant :*

$$Im\Omega_{\pm} = Im\Omega_{\pm}^{NAD}.$$

L'existence des opérateurs d'onde $\Omega_{\pm}^{AD}$ permet d'affirmer que le spectre continu de P^{AD} contient l'intervalle $[E_0; +\infty[= \sigma(P_a\Pi_0)$. Il y a en fait égalité (cf. [KMW1]) et on va en donner une preuve.

Proposition 2.3.6. *([KMW1]) Les spectres continu et absolument continu de P^{AD} sont donnés par :*

$$\sigma_{ac}(P^{AD}) = \sigma_c(P^{AD}) = [E_0; +\infty[.$$

Démonstration : Comme on l'a déjà dit, l'existence des opérateurs $\Omega_\pm^{AD}$ implique que l'opérateur P^{AD}, restreint à $Im\Omega_\pm^{AD}$ est unitairement équivalent à $P_a\Pi_0$ (cf. [RS3] p18). Par conséquent, on a :

$$[E_0;+\infty[=\sigma_{ac}(P_a\Pi_0)\subset\sigma_{ac}(P^{AD})\subset\sigma_c(P^{AD}).$$

Passons à l'autre inclusion. Comme on a : $\sigma_c(P^{AD})\subset\sigma_{ess}(P^{AD})$, le spectre essentiel de P^{AD}, on étudie ce dernier. D'après le théorème de Weyl (cf [RS4] p106) et le fait que l'opérateur $\Pi(P_e-E_0)$ est P^{AD}-compact (cf. la proposition 1.2.4 et le lemme 1.2.11), on a $\sigma_{ess}(P^{AD})=\sigma_{ess}(P_0^{AD})$ avec $P_0^{AD}\equiv\Pi(-h^2\Delta_x+E_0)\Pi$. En utilisant le "petit" théorème de Weyl (cf.[RS1]), on montre dans l'annexe B l'inclusion :

$$\sigma(P_0^{AD})\subset\{0\}\cup[E_0;+\infty[.$$

Comme le spectre continu de P^{AD} ne peut contenir un point isolé, on a en fait :

$$\sigma_c(P^{AD})\subset[E_0;+\infty[$$

ce qui donne le résultat annoncé. $\square$

Remarquons que, compte tenu des hypothèses faites sur les potentiels, la valeur propre E_0 est forcément strictement négative. Pour vérifier ce point, il suffit d'avoir :

$$\inf\sigma_{ess}(P^a)\leq 0$$

grâce au théorème HVZ (cf. [RS3] ou [CFKS]). De plus, ce même théorème affirme que l'on a :

$$\inf\sigma_{ess}(P^a)=\min_{\substack{\sharp b\geq 3\\ b\subset a}}\inf\sigma(P^b)$$

où les notations "$\sharp b$" et "$b\subset a$" sont définies au paragraphe 3.1. Toujours avec les notations de ce paragraphe 3.1, on a aussi :

$$b\subset c\Longrightarrow\inf\sigma(P^c)\leq\inf\sigma(P^b)$$

(c'est une conséquence du théorème HVZ, cf. [RS4]). En choisissant une décomposition $b\subset a$ telle que $\sharp b=N+2-1$, on voit que $\inf\sigma(P^b)\leq 0$ car le potentiel V_b tend vers 0 à l'infini. On en déduit que $E_0<0$ et le :

Corollaire 2.3.7. *On a en fait :*

$$\sigma_{ess}(P^{AD})=\sigma_c(P^{AD})=[E_0;+\infty[.$$

A cause de l'existence des opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{NAD}$ (cf. proposition 2.3.4), on déduit de cette proposition 2.3.6 un autre corollaire donnant une information spectrale sur P :

Corollaire 2.3.8. *Le spectre continu de P contient l'intervalle* $[E_0;+\infty[$.

2.4 Opérateurs d'onde en présence de singularités coulombiennes.

L'existence et la complétude des opérateurs d'onde du paragraphe 2.3 sont encore valable sous l'hypothèse (S_ρ), $\rho > 1$, du paragraphe 1.3, qui autorise des singularités coulombiennes pour $n \geq 3$ (cf. [KMW1]). On se propose ici de reprendre ces résultats en donnant une preuve de l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$, différente de celle de [KMW1].

Notons tout d'abord qu'à l'exception de la proposition 2.1.4 (concernant les commutateurs multiples), tous les résultats des paragraphes 2.1 et 2.2 sont conservés, pour $\rho > 0$, grâce aux résultats du paragraphe 1.3. Dans les preuves en effet, le projecteur $\Pi(x)$ et le potentiel $I_a(x)$ sont dérivés au plus deux fois et les dérivées de $I_a(x)$ sont toujours "encadrées" par deux projecteurs $\Pi(x)$.

Pour $\rho > 1$, on reprend les résultats du paragraphe 2.3. La preuve du lemme 2.3.1 et par conséquent celle de l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$ ne sont plus valables.

Dans [Ra] et [KMW1], l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$ est essentiellement établie à partir du théorème d'absorption limite pour P (cf. [PSS]). On va montrer que l'on peut adapter la preuve de la proposition 2.3.4 sous l'hypothèse (S_ρ), $\rho > 1$. Pour remplacer la proposition 2.1.4, on a le lemme :

Lemme 2.4.1. *Les commutateurs $[P^{AD}, A^{AD}]_2$ et $[P^{AD}, A^{AD}]_3$ sont bornés de $\mathcal{H}_{+2}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-1}^{AD}$ et dans $\mathcal{H}_{-2}^{AD}$, respectivement. $(\mathcal{H}_p^{AD})_{p\in\mathbb{Z}}$ désigne l'échelle d'espaces associée à P^{AD} (cf. [RS2]).*

Démonstration : Pour alléger les notations, on note dans cette preuve $(\nabla_x\Pi)$ par $\nabla\Pi$, $(\Delta_x\Pi)$ par $\Delta\Pi$ et $(\nabla_x I_a)$ par ∇I_a. Sur $\mathcal{D}(P^{AD}) \cap \mathcal{D}(A^{AD})$, le commutateur $i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ$ est donné par (2.1 ;2) :

$$\begin{aligned} i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ &= 2\Pi(-\Delta_x)\Pi - 2\Pi\nabla_x \cdot \nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi \\ &- 2\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\nabla\Pi\cdot\nabla_x\Pi - \Pi\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi \\ &- \Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Delta\Pi\Pi + \Pi(x\cdot\nabla I_a)\Pi \end{aligned}$$

(cf. remarque 2.1.2). On a :

$$[\Pi(x\cdot\nabla I_a)\Pi, \Pi A\Pi] = \Pi[x\cdot\nabla I_a, A]\Pi + \Pi[\Pi, A](x\cdot\nabla I_a)\Pi + \Pi(x\cdot\nabla I_a)[\Pi, A]\Pi.$$

Comme $i[x\cdot\nabla I_a, A] = -(x\cdot\nabla)^2 I_a$, on voit que ces opérateurs sont bornés (cf. proposition 1.2.4). Le terme $[\Pi(-\Delta_x)\Pi, \Pi A\Pi]$ a déjà été calculé et vaut :

$$2\Pi(-\Delta_x)\Pi - \Pi(-\Delta_x)(x\cdot\nabla\Pi)\Pi - \Pi(x\cdot\nabla\Pi)(-\Delta_x)\Pi,$$

où le premier terme est borné de $\mathcal{H}_{+1}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-1}^{AD}$, le deuxième de $\mathcal{H}_0^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-1}^{AD}$ et le troisième de $\mathcal{H}_{+1}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_0^{AD}$.

En écrivant :

$$\begin{aligned} [\Pi\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi, \Pi A\Pi] &= \Pi\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)[\Pi, A]\Pi + \Pi[\Pi, A]\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi \\ &+ \Pi\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)A\Pi - \Pi A\Delta\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi \end{aligned}$$

avec :

$$A\Pi = -i(x\cdot\nabla_x + n/2)\Pi \ \text{ et } \ \Pi A = -i\Pi(\nabla_x \cdot x - n/2),$$

on voit que, grâce à la proposition 1.2.4, ce terme est borné de $\mathcal{H}_{+1}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-1}^{AD}$. Il en est de même de la contribution de $\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Delta\Pi\Pi$.

Enfin, on a :

$$\begin{aligned}[]
[\Pi\nabla_x\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi, \Pi A\Pi] &= \Pi\nabla_x\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)[\Pi,A]\Pi + \Pi[\Pi,A]\nabla_x\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi \\
&+ \Pi[\nabla_x\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi), A]\Pi.
\end{aligned}$$

Le deuxième terme peut s'écrire :

$$\Pi[[\Pi,A],\nabla_x]\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi + \Pi\nabla_x\cdot[\Pi,A]\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi,$$

et le troisième sous la forme :

$$\Pi[\nabla_x, A]\cdot\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi)\Pi + \Pi\nabla_x\cdot[\nabla\Pi(x\cdot\nabla\Pi), A]\Pi,$$

avec $[\nabla_x, A] = -i\nabla_x$. On en déduit que ces trois termes sont bornés de $\mathcal{H}_0^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-1}^{AD}$. On traite de même la dernière contribution, qui est bornée de $\mathcal{H}_{+1}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_0^{AD}$.

Les arguments précédents permettent de vérifier que $[P^{AD}, A^{AD}]_3$ est borné de $\mathcal{H}_{+2}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-2}^{AD}$. $\square$

Grâce à ce lemme 2.4.1, $[P^{AD}, A^{AD}]_2$ est borné de $\mathcal{H}_{+2}^{AD}$ dans $\mathcal{H}_{-2}^{AD}$, on peut donc suivre la méthode de Mourre et obtenir les points 1. et 2. du théorème 2.1.6. On peut donc refaire la démonstration de la proposition 2.3.2 et obtenir l'existence et la complétude de $\Omega_\pm^{AD}$. Donnons maintenant une nouvelle preuve de l'existence des opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{NAD}$ sous l'hypothèse (S_ρ) :

Nouvelle preuve de l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$: On utilise une généralisation de la méthode des commutateurs multiples (cf. [JMP] et [PSS]). Avec les notations de [JMP], on peut développer la théorie des commutateurs multiples pour un opérateur H $n-$lisse par rapport à un certain A, H et A étant de plus conjugués près d'un point, en supposant dans l'hypothèse (c_n) que les B_j sont seulement bornés de $\mathcal{H}_{+2}$ dans $\mathcal{H}_{-1}$.

Par le lemme 2.4.1, P^{AD} est 2-lisse par rapport à A^{AD}. De plus, la décroissance en x de $(P - P^{AD})E_{ac}(P^{AD})$ est de $\rho + 1 > 2$. En reprenant les arguments de la preuve du théorème 4.4 de [JMP], on rétablit le lemme 2.3.1 pour $s > s' > 1$, ce qui permet de reprendre la preuve précédente de l'existence de $\Omega_\pm^{NAD}$. $\square$

Bien entendu, la preuve de la proposition 2.3.5, relative à la complétude de $\Omega_\pm^{NAD}$, reste valable sous l'hypothèse (S_ρ). Grâce aux propriétés du paragraphe 1.3, on peut également reprendre les preuves de la proposition 2.3.6 et du corollaire 2.3.7 sous cette hypothèse.

2.5 Prise en compte de plusieurs valeurs propres du spectre discret de P^a.

La construction d'un opérateur adiabatique P^{AD} peut se faire dans un cadre plus général. Au lieu d'une seule valeur propre du spectre discret de P^a, on en considère plusieurs. Moyennant une hypothèse de stabilité convenable, on va voir que l'on retrouve les résultats des parties 1 et 2. C'est également dans ce cadre élargi que l'on définira des sections efficaces totales (cf. partie 3).

On suppose que les potentiels vérifient la condition (D_ρ) pour un $\rho > 0$. Considérons $E_1 < \ldots < E_r$ des valeurs propres du spectre discret de P^a, chaque E_j étant de multiplicité m_j et vérifiant l'hypothèse de stabilité (HS) du paragraphe 1.2. Pour chaque j, les projecteurs Π_{j0} et $\Pi_j(x)$ correspondants vérifient les propriétés de ce paragraphe 1.2. Les opérateurs $P_j^{AD} = \Pi_j P \Pi_j$ et $A_j^{AD} = \Pi_j A \Pi_j$ possèdent les propriétés des paragraphes 1.2 et 2.1. On pose :

$$\Pi_0 = \sum_{j=1}^{r} \Pi_{j0},\ \Pi(x) = \sum_{j=1}^{r} \Pi_j(x).$$

Ces projecteurs vérifient également les propriétés du paragraphe 1.2, la dernière estimation de la proposition 1.2.4 étant remplacée par la suivante :

$$||\Pi(x)P_e(x)\Pi(x) - \sum_{j=1}^{r} E_j \Pi_j(x)|| = O(< x >^{-\rho}). \tag{2.5;1}$$

Enfin, le nouvel opérateur P^{AD} vérifie les propriétés du paragraphe 1.2. Grâce à toutes ces propriétés, on peut reprendre les résultats du paragraphe 2.1 avec l'opérateur :

$$A^{AD} = \sum_{j=1}^{r} \epsilon_j A_j^{AD}$$

(pour $\epsilon_j \in \{\pm 1\}$, $1 \leq j \leq r$). On détaille l'estimation de Mourre (cf. proposition 2.1.5) :

Proposition 2.5.1. *Soit $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\}$. Pour tout j, soit ϵ_j le signe de la différence $E - E_j$. Il existe $\alpha, \delta > 0$ et un opérateur compact K tels que :*

$$\chi(P^{AD}) i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ \chi(P^{AD}) \geq \alpha \chi(P^{AD}) + \chi(P^{AD}) K \chi(P^{AD}),$$

où $\chi = \mathbb{1}_{]E-\delta, E+\delta[}$, la fonction caractéristique de l'intervalle $]E - \delta, E + \delta[$.

Démonstration : Prenons $\theta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$ telle que $\chi\theta = \chi$ et $supp\theta \in]E - 2\delta, E + 2\delta[$, $\delta > 0$ étant à choisir. Tout d'abord, on a :

$$\begin{aligned} i[P^{AD}, A^{AD}] &= \sum_{j=1}^{r} \epsilon_j i[\Pi(-\Delta_x)\Pi, \Pi_j A \Pi_j] \\ &= \sum_{j=1}^{r} \epsilon_j (\Pi i[-\Delta_x, \Pi_j] A \Pi_j + \Pi_j A i[-\Delta_x, \Pi_j]\Pi + \Pi_j i[-\Delta_x, A]\Pi_j). \end{aligned}$$

D'après les propriétés des projecteurs Π_j, on a donc, pour $\delta > 0$:

$$\theta(P^{AD})i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ\theta(P^{AD}) = 2\theta(P^{AD})\left(\sum_{j=1}^{r}\epsilon_j\Pi_j(-\Delta_x)\Pi_j\right)\theta(P^{AD}) + K_1$$

où K_1 est un opérateur compact. On s'appuie maintenant sur le lemme suivant (très proche du lemme 2.2.3) :

Lemme 2.5.2. *Soit $\theta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$. Pour tout $1 \leq j \leq r$, l'opérateur $\theta(P^{AD})\Pi_j - \theta(P_j^{AD})\Pi_j$ est compact.*

Démonstration : L'opérateur :

$$(P^{AD} - P_j^{AD})\Pi_j = \Pi[-\Delta_x, \Pi_j]\Pi_j$$

est P^{AD}-compact. Grâce au calcul fonctionnel d'Helffer-Sjöstrand (cf. [HS] ou bien le lemme 2.2.3), on peut reprendre la preuve de ce lemme 2.2.3 pour obtenir le résultat. □

Grâce à ce lemme 2.5.2, on peut trouver un opérateur compact K_2 tel que :

$$\theta(P^{AD})i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ\theta(P^{AD}) = 2\sum_{j=1}^{r}\epsilon_j\theta(P_j^{AD})\Pi_j(-\Delta_x)\Pi_j\theta(P_j^{AD}) + K_2.$$

Or, on a :

$$\Pi_j(-\Delta_x)\Pi_j = (P_j^{AD} - E_j)\Pi_j - (P_e - E_j)\Pi_j,$$

où le second terme est P_j^{AD}-compact. On en déduit que :

$$\begin{aligned}\theta(P^{AD})i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ\theta(P^{AD}) &\geq \sum_{j=1}^{r}\epsilon_j(E - E_j - 2\epsilon_j\delta)\theta(P_j^{AD})^2 + K_3\\ &\geq \alpha\theta(P^{AD})^2 + K_4,\end{aligned}$$

pour δ assez petit, où $\alpha > 0$ et K_3, K_4 sont des opérateurs compacts. Il suffit de composer à droite et à gauche par $\chi(P^{AD})$ pour obtenir le résultat. □

Ainsi, sous les hypothèses du présent paragraphe, le théorème 2.1.6 est encore valable pour $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\} \cup \sigma_p(P^{AD})$. On a donc le :

Théorème 2.5.3. *On suppose que les potentiels vérifient la condition (D_ρ) pour un $\rho > 0$, que les valeurs propres $E_1 < \ldots < E_r$ du spectre discret de P^a vérifient chacune l'hypothèse de stabilité (HS). Près de tout point $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\} \cup \sigma_p(P^{AD})$, le théorème d'absorption limite 2.1.6 pour P^{AD} est valable.*

De plus, on peut reprendre à l'identique les arguments du paragraphe 2.2 et obtenir ainsi l'équivalent du théorème 2.2.6 :

Théorème 2.5.4. *Sous les hypothèses du théorème 2.5.3, le théorème d'absorption limite pour P est valable près de tout point $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\} \cup \sigma_p(P)$ vérifiant $E \notin \sigma(Q^{AD})$.*

A partir de l'estimation (2.5 ;1), on montre, comme au paragraphe 2.3, que les nouveaux opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{AD}$ et $\Omega_\pm^{NAD}$ existent et sont complets, lorsque $\rho > 1$. L'étude du spectre essentiel de P^a, faite dans ce paragraphe 2.3, montre que l'on a $E_1 < \ldots < E_r < 0$. Enfin, la proposition 2.3.6 devient ici :

Proposition 2.5.5. *Les spectres essentiel, continu et absolument continu de P^{AD} sont donnés par :*

$$\sigma_{ess}(P^{AD}) = \sigma_{ac}(P^{AD}) = \sigma_c(P^{AD}) = [E_1; +\infty[.$$

Démonstration : Cette fois, on a :

$$P_a\Pi_0 = \sum_{j=1}^{r}(-\Delta_x + E_j)\Pi_{j0}.$$

Le spectre absolument continu de $P_a\Pi_0$ est donc donné par : $\sigma_{ac}(P_a\Pi_0) = [E_1; +\infty[$. L'existence des opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{AD}$ fournit l'inclusion suivante :

$$[E_1; +\infty[\subset \sigma_{ac}(P^{AD})(\subset \sigma_c(P^{AD}) \subset \sigma_{ess}(P^{AD})).$$

D'après l'estimation (2.5 ;1), l'opérateur :

$$\Pi P_e - \sum_{j=1}^{r} E_j\Pi_j$$

est P^{AD}-compact. De plus, pour $j \neq k$, l'opérateur $\Pi_j(-\Delta_x)\Pi_k = -[-\Delta_x, \Pi_j]\Pi_k$ est aussi P^{AD}-compact. D'après le théorème de Weyl, on en déduit que $\sigma_{ess}(P^{AD}) = \sigma_{ess}(P_0^{AD})$ pour :

$$P_0^{AD} = \sum_{j=1}^{r} P_{j0}^{AD} = \sum_{j=1}^{r} \Pi_j(-\Delta_x + E_j)\Pi_j.$$

D'après la preuve de la proposition 2.3.6, on a, pour tout j, $\sigma(P_{j0}^{AD}) \subset [E_j; +\infty[$ donc $\sigma(P_0^{AD}) \subset [E_1; +\infty[$. On obtient donc les inclusions suivantes :

$$\sigma_{ac}(P^{AD}) \subset \sigma_c(P^{AD}) \subset \sigma_{ess}(P^{AD}) \subset [E_1; +\infty[$$

et le résultat. $\square$

Comme au paragraphe 2.3, l'existence des opérateurs $\Omega_\pm^{NAD}$ permet d'avoir le :

Corollaire 2.5.6. *Le spectre continu de P contient l'intervalle $[E_1; +\infty[$.*

3 Sections efficaces totales.

Les sections efficaces présentent un important intérêt physique car elles se prêtent bien à des expérimentations. Pour une direction d'incidence fixée, on va s'intéresser ici, pour certaines valeurs de l'énergie, aux sections efficaces totales issues d'un canal α, à deux amas, dont l'énergie est stable au sens du paragraphe 2.5. On introduit aussi des sections efficaces totales adiabatiques issues du même canal. L'étude semi-classique de ses sections est renvoyée à la partie 5.

3.1 Formulation géométrique du système étudié.

Avant de définir les sections efficaces totales associées à la décomposition du paragraphe 1.1, on donne une formulation géométrique de P. Il s'agit de la formulation géométrique d'Agmon (cf. [A]) des opérateurs de Schrödinger à N-corps. Comme la structure géométrique est construite à partir des masses, la dépendance en h se trouve cachée dans cette structure.

Soit X le sous-espace de $I\!R^{n(N+2)}$ défini par :

$$X \equiv \{x = (x_j)_{1\leq j\leq N+2} \in I\!R^{n(N+2)};\ m_1x_1 + m_2x_2 + \sum_{j=3}^{N+2} x_j = 0\},$$

c'est-à-dire l'ensemble des répartitions de masses dont le centre de masse se trouve en 0. On considère sur $I\!R^{n(N+2)}$ la forme quadratique définie positive suivante :

$$q_1(x) = 2m_1|x_1|^2 + 2m_2|x_2|^2 + 2\sum_{j=3}^{N+2} |x_j|^2.$$

Le facteur 2 est introduit à cause des facteurs 1/2 figurant dans P (cf. paragraphe 1.1). Notons par q sa restriction à X, par $< \cdot, \cdot >_q$ la forme bilinéaire associée, par $|\cdot|_q$ la norme associée et par $< \cdot >_q$ la quantité $(1 + |\cdot|_q^2)^{1/2}$. Désignons par $< \cdot, \cdot >_X$ et par $||\cdot||_X$ le produit scalaire et la norme de $L^2(X)$. On a la décomposition suivante :

$$I\!R^{n(N+2)} = X \oplus X^{\perp} \qquad (3.1;1)$$

Prenons une décomposition en amas a, c'est-à-dire une partition de $\{1, \ldots, N+2\}$. Les amas sont notés par $A_1, \ldots, A_l$ et leur nombre par $\sharp a$ ($\sharp a = l$). On définit le sous-espace des "variables internes" associé à a par :

$$X^a \equiv \{x = (x_j)_{1\leq j\leq N+2} \in I\!R^{n(N+2)};\ \forall k \in < 1, \sharp a >,\ \sum_{j\in A_k} m_j' x_j = 0\}$$

(avec $m_1' = m_1$, $m_2' = m_2$ et $m_j' = 1$ pour $j \geq 3$). C'est un sous-espace de X. Le sous-espace des "variables externes" associé à a est donné par :

$$X_a \equiv \{x = (x_j)_{1\leq j\leq N+2} \in X;\ \forall k \in < 1, \sharp a >,\ (j, l \in A_k \Longrightarrow x_j = x_l)\},$$

on note par $\mathbb{S}_a$ sa sphère unité. On a :

$$X_a = (X^a)^\perp \text{ et } X = X_a \oplus X^a.$$

On notera par x_a (respectivement x^a) la projection orthogonale d'un vecteur $x \in X$ sur X_a (respectivement X^a), par dx_a (respectivement dx^a) la mesure riemannienne sur X_a (respectivement X^a), par $< \cdot, \cdot >_a$ (respectivement $< \cdot, \cdot >^a$) le produit scalaire sur $L^2(X_a)$ (respectivement $L^2(X^a)$) et par $|| \cdot ||_a$ (respectivement $|| \cdot ||^a$) la norme correspondante. On utilisera l'indice "*sa*" pour les objets correspondants à la sphère $\mathbb{S}_a$. Notons que, pour $\sharp a = 2$, on a $dimX_a = n$.

On introduit la relation d'ordre suivante sur $\mathcal{A}$, l'ensemble des décompositions en amas :

$$\begin{aligned} a \subset b \iff & X^a \subset X^b \iff X_b \subset X_a \\ \iff & \forall j \in < 1, \sharp a >, \forall k \in < 1, \sharp b >, \, (A_j \cap B_k \neq \emptyset \Longrightarrow A_j \subset B_k). \end{aligned}$$

On a donc $a \subset b$ si a est obtenue de b en décomposant en amas chaque amas de b. Cette relation d'ordre admet un plus petit élément a_{min}, qui est la partition en $N + 2$ amas, et un plus grand élément a_{max}, qui est la partition en un amas. On a :

$$X^{a_{min}} = 0, X_{a_{min}} = X, X^{a_{max}} = X, X_{a_{max}} = 0.$$

On peut définir aussi la décomposition $a \cup b$ qui est la plus petite décomposition qui majore a et b. Elle vérifie les propriétes suivantes :

$$X^{a \cup b} = X^a + X^b, \, X_{a \cup b} = X_a \cap X_b,$$

$$\exists \delta > 0; \, \forall x \in X, \, |x^a|_q + |x^b|_q \geq \delta |x^{a \cup b}|_q. \qquad (3.1;2)$$

Si b est la décomposition en $N+1$ amas où les particules j et l sont ensembles, alors on a $x_j - x_l \in X^b$ et $dimX^b = n$. On peut donc écrire $V_{jl}(x_j - x_l)$ sous la forme $V_b(x^b)$. Grâce à la décomposition (3.1 ;1), on peut retirer le centre de masse de l'hamiltonien quantique H (cf. paragraphe 1.1) et l'opérateur obtenu est de la forme :

$$\tilde{P} = -\Delta + \sum_{a \in \mathcal{A}} V_a(x^a),$$

où $-\Delta$ est l'opérateur de Laplace-Beltrami sur (X, q) et les V_a des fonctions de $C^\infty(X^a; \mathbb{R})$ vérifiant :

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^{n_a}, \, \exists C_\alpha > 0; \, \forall y \in X^a, |\partial^\alpha V_a(y)| \leq C_\alpha < y >_q^{-\rho - |\alpha|}. \qquad (3.1;3)$$

avec $n_a = dimX^a$ et $\rho > 0$.

Pour une décomposition en amas a, on pose :

$$\tilde{P}^a = -\Delta^a + \sum_{b \subset a} V_b(x^b), \, \tilde{P}_a = \tilde{P}^a - \Delta_a$$

et :

$$\tilde{I}_a(x) = \sum_{b \not\subset a} V_b(x^b),$$

où $-\Delta^a$ et $-\Delta_a$ sont les opérateurs de Laplace-Beltrami sur X^a et X_a respectivement. Pour toute décomposition $a \in \mathcal{A}$, on a :

$$\tilde{P} = \tilde{P}_a + \tilde{I}_a.$$

Prenons maintenant la décomposition a du paragraphe 1.1 et faisons le lien entre les opérateurs précédents et ceux définis dans ce paragraphe 1.1. Avec les notations de ce paragraphe, on note par R_k le centre de masse de l'amas A_k ($k \in \{1,2\}$) :

$$R_k = \frac{1}{M_k}\left(m_k x_k + \sum_{j \in A_k'} x_j\right).$$

On a donc :

$$X^a = \{r = (x_j)_{1 \leq j \leq N+2} \in X;\ R_1 = R_2 = 0\}$$

et :

$$X_a = \{r = (x_j)_{1 \leq j \leq N+2} \in X;\ \forall k \in <1,2>,\ (j,l \in A_k \Longrightarrow x_j = x_l)\}.$$

Pour $r \in X$, on voit que la j-ième composante de r_a est :

$$\begin{cases} R_1 & \text{si} \quad j \in A_1, \\ R_2 & \text{si} \quad j \in A_2, \end{cases}$$

et la j-ième composante de r^a est :

$$\begin{cases} x_j - R_1 & \text{si} \quad j \in A_1, \\ x_j - R_2 & \text{si} \quad j \in A_2. \end{cases}$$

En inversant le changement de variables introduit au paragraphe 1.1, on exprime les composantes de r_a :

$$\begin{cases} \frac{M_2}{M} x & \text{si} \quad j \in A_1, \\ \\ -\frac{M_1}{M} x & \text{si} \quad j \in A_2, \end{cases}$$

et celles de r^a :

$$\begin{cases} -\frac{1}{M_1} \sum_{l \in A_1'} y_l & \text{si} \quad j = 1, \\ \\ -\frac{1}{M_2} \sum_{l \in A_2'} y_l & \text{si} \quad j = 2, \\ \\ y_j - \frac{1}{M_k} \sum_{l \in A_k'} y_l & \text{si} \quad j \in A_k',\ k \in <1,2>, \end{cases}$$

en fonction de $x \in I\!R^n$ et $y \in I\!R^{nN}$. On pose $r_a = u_a(x)$ et $r^a = u^a(y)$, et on définit les applications suivantes :

$$\begin{array}{rccl} U_a : & L^2(X_a) & \longrightarrow & L^2(I\!R^n), \\ & f & \mapsto & N_a(h) f \circ u_a, \end{array} \qquad \begin{array}{rccl} U^a : & L^2(X^a) & \longrightarrow & L^2(I\!R^{nN}), \\ & g & \mapsto & N^a(h) g \circ u^a. \end{array}$$

Par définition, la mesure sur dx_a sur X_a est la mesure image par u_a de la mesure à densité $d_a(x)^{1/2}dx$ où $d_a(x)$ est le déterminant de la matrice :

$$\left(< u'_a(x)\frac{\partial}{\partial x^i}(x), u'_a(x)\frac{\partial}{\partial x^j}(x) >_q \right)_{i,j}$$

et $u'_a(x)$ est la différentielle de u_a au point x. En calculant les coefficients de cette matrice (qui sont constants puisque u_a est linéaire), on voit que l'on a, pour tout x :

$$d_a(x) = d_a = \left(\frac{M_1M_2}{M}\right)^n (1 + O(h^2)) = h^{-2n}c_a(h)^4$$

où $c_a(h) \to c_a \neq 0$, lorsque $h \to 0$. En prenant $N_a(h) = c_a(h)h^{-n/2}$, la transformation U_a devient unitaire. De même la mesure dx^a sur X^a est la mesure image par u^a de $d^a(y)^{1/2}dy$ où $d^a(y) = d^a = 1 + O(h^2) = c^a(h)^4$ et en prenant $N^a(h) = c^a(h)$, la transformation U^a est unitaire.

Par définition des opérateurs de Laplace-Beltrami $-\Delta^a$ et $-\Delta_a$, on a :

$$U_a(-\Delta_a)U_a^{-1}f = -\frac{M}{2M_1M_2}\Delta_x f = -h^2\Delta_x f$$

pour $f \in \mathcal{S}(I\!R^n)$ et :

$$U^a(-\Delta^a)(U^a)^{-1}g = -\Delta_y g + h^2 HEg$$

pour $g \in \mathcal{S}(I\!R^{nN})$ (l'opérateur HE est défini par (1.1 ;3)). Ainsi, en notant par U_a^a l'extension de l'application :

$$(f, g) \in L^2(X_a) \times L^2(X^a) \mapsto (U_a f)(U^a g) \in L^2(I\!R^{n(N+1)})$$

à $L^2(X)$, on a :

$$U_a^a \tilde{P}(U_a^a)^{-1}\phi = P\phi,\ U_a^a \tilde{P}_a(U_a^a)^{-1}\phi = P_a\phi$$

pour $\phi \in \mathcal{S}(I\!R^{n(N+1)})$ et :

$$U^a \tilde{P}^a(U^a)^{-1}\psi = P^a\psi$$

pour $\psi \in \mathcal{S}(I\!R^{nN})$.

3.2 Définition des différentes sections efficaces totales.

Traditionnellement, les sections efficaces totales sont construites à partir de l'amplitude de diffusion (cf. [AJS]). Cependant, nous prendrons une autre définition (cf. [ES], [RT], [W5]) qui ne diffère de la précédente que d'un facteur multiplicatif ne dépendant que de l'énergie (cf. proposition 3.4.3). On utilise une définition analogue avec l'opérateur P^{AD} pour les sections efficaces totales adiabatiques.

On se place dans le cadre géométrique du paragraphe 3.1. Pour $a \neq a_{max}$, on appelle canal de diffusion un triplet $\alpha = (a, E_\alpha, \tilde{\phi}_\alpha)$, où $E_\alpha \in \sigma_{pp}(\tilde{P}^a)$ et où $\tilde{\phi}_\alpha$ est une fonction propre orthonormée :

$$\tilde{P}^a\tilde{\phi}_\alpha = E_\alpha\tilde{\phi}_\alpha,\ ||\tilde{\phi}_\alpha||^a = 1.$$

Pour $a = a_{min}$, on a $\tilde{P}^a = 0$ et $\tilde{P}_a = -\Delta$. Dans ce cas, on a un seul canal, le canal libre, que l'on note par convention : $(a_{min}, 0, 1)$.

Pour chaque canal α, on appelle I_α l'intervalle $]E_\alpha; +\infty[$ et on pose :

$$n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_\alpha)^{1/2}, \text{ pour } \lambda \in I_\alpha.$$

On introduit un identificateur $\tilde{\mathcal{J}}_\alpha$ défini par :

$$\begin{array}{rccl} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha : & L^2(X_a) & \longrightarrow & L^2(X) \\ & f & \mapsto & (\tilde{\mathcal{J}}_\alpha f)(x) = f(x_a)\tilde{\phi}_\alpha(x^a). \end{array}$$

La projection orthogonale $\tilde{\Pi}_\alpha$ sur la droite engendrée par $\tilde{\phi}_\alpha$ est donnée par $\tilde{\Pi}_\alpha = \tilde{\mathcal{J}}_\alpha \tilde{\mathcal{J}}_\alpha^*$. Sous la condition (3.1 ;3) pour $\rho > 1$, les opérateurs d'onde de canal :

$$\tilde{\Omega}_\pm^\alpha = s - \lim_{t \to \pm\infty} e^{it\tilde{P}} e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha$$

existent et sont complets (cf. [SS]). Etant donnés deux canaux α et β, l'opérateur de diffusion de α vers β est défini par :

$$\tilde{S}_{\beta\alpha} = (\tilde{\Omega}_+^\beta)^* \tilde{\Omega}_-^\alpha : L^2(X_a) \longrightarrow L^2(X_b).$$

En notant par $\delta_{\beta\alpha}$ l'opérateur borné de $L^2(X_a)$ dans $L^2(X_b)$ qui vaut l'identité si $\alpha = \beta$ et 0 sinon, on définit l'opérateur de transition de α vers β par :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \tilde{S}_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}.$$

Pour $\omega_a \in \mathbb{S}_a$ et $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$, on veut appliquer l'opérateur $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ à la fonction $g_{\omega_a}(x_a) = \hat{g}(< x_a, \omega_a >_q)$ où :

$$\hat{g}(t) = \frac{1}{2(\pi)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{in_\alpha(\lambda)t} \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}} d\lambda$$

et où la constante est choisie telle que :

$$||\hat{g}||_{L^2(\mathbb{R})} = ||g||_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Malheureusement, g_{ω_a} n'est pas dans $L^2(X_a)$. Elle est cependant dans l'espace de Schwartz dans la direction ω_a (car $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$). On l'approxime donc par des fonctions $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$, où les fonctions $h_R^{\omega_a}$ sont dans l'espace de Schwartz de la variable $x_a - < x_a, \omega_a >_q \omega_a$ et convergent ponctuellement vers 1 lorsque $R \to \infty$. On peut prendre par exemple :

$$h_R^{\omega_a}(x_a) = e^{-R^{-1}|x_a - < x_a, \omega_a >_q \omega_a|_q^2}.$$

La section efficace totale $\sigma_{\beta\alpha}(\cdot, \omega_a)$ du canal α vers le canal β, pour la direction d'incidence ω_a, est la distribution de $\mathcal{D}'(I_\alpha)$ déterminée par les limites :

$$\int \sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a) |g(\lambda)|^2 d\lambda = \lim_{R \to \infty} ||\tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_b^2$$

pour tout $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$, sous réserve de leur existence. La section efficace totale σ_α, du canal d'entrée α, pour la direction d'incidence ω_a, est définie de même à partir des limites suivantes :

$$\int \sigma_\alpha(\lambda, \omega_a)|g(\lambda)|^2 d\lambda = \lim_{R\to\infty} \sum_\beta ||\tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_b^2$$

pour tout $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$, sous réserve de leur existence.

On s'intéresse aux sections efficaces totales issues d'un canal $\alpha = (a, E_\alpha, \tilde{\phi}_\alpha)$ particulier. La décomposition en amas a est la décomposition en deux amas du paragraphe 1.1. L'énergie E_α est une valeur propre du spectre discret de $\tilde{P}^a$ et vérifie l'hypothèse de stabilité (HS) du paragraphe 1.2. On dira que ce canal est stable.

L'approximation de Born-Oppenheimer consiste à dire que l'opérateur P peut être remplacé par P^{AD} lorsque $h \to 0$ et elle a été vérifiée pour les opérateurs d'onde de canal (cf. [KMW1]). Dans la situation du paragraphe 2.5, on s'attend donc à ce que la diffusion issue du canal α, représentée par les opérateurs $\tilde{S}_{\beta\alpha}$, soit bien décrite par l'opérateur de diffusion $S^{AD}\Pi_\alpha$ avec :

$$S^{AD} \equiv (\Omega_+^{AD})^* \Omega_-^{AD}$$

(cf. paragraphe 2.3 et 2.5), où Π_α désigne la projection sur la droite engendrée par $\phi_\alpha = U^a\tilde{\phi}_\alpha$. Ainsi, la section efficace totale σ_α devrait être approchée par la section efficace totale “adiabatique” σ_α^{AD} définie par les limites :

$$\int \sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega)|g(\lambda)|^2 d\lambda = \lim_{R\to\infty} ||(S^{AD} - \Pi_0)U_a^a(h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}\tilde{\phi}_\alpha)||^2$$

pour tout $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$. La norme considérée est celle de $L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$, $\omega \in S^{n-1}$ est donné par $u_a(h\omega) = \omega_a$ et on prend une suite $(h_R^{\omega_a})_R$ de la forme :

$$h_R^{\omega_a}(x) = h^{\omega_a}(x/R)$$

avec $h^{\omega_a}(0) = 1$ et $h^{\omega_a} \in \mathcal{S}(H_{\omega_a})$ (H_{ω_a} étant l'hyperplan orthogonal à ω_a). De plus, pour la diffusion adiabatique, il est naturel de considérer des canaux de sortie β, de décomposition a, dont l'énergie E_β est l'une des valeurs propres E_j du spectre discret de $\tilde{P}^a$, considérées au paragraphe 2.5. On peut donc avoir $E_\beta \neq E_\alpha$. Comme la multiplicité de cette énergie E_α est a priori strictement supérieure à 1 (cf. paragraphe 2.5), on peut avoir $\alpha \neq \beta$ même si $E_\beta = E_\alpha$. Pour un tel canal de sortie, on peut espérer approximer la section efficace totale $\sigma_{\beta\alpha}$ par la section efficace totale “adiabatique” $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$ correspondante, définie par les limites :

$$\int \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda, \omega)|g(\lambda)|^2 d\lambda = \lim_{R\to\infty} ||\Pi_\beta(S^{AD} - \Pi_0)U_a^a(h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}\tilde{\phi}_\alpha)||^2$$

pour tout $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$. On verra dans la partie 5 que, pour certaines énergies, σ_α^{AD} (respectivement $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$) approxime bien σ_α (respectivement $\sigma_{\beta\alpha}$).

Pour terminer ce paragraphe, détaillons quelques propriétés de propagation des états $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$. On a déja signalé que $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} \in \mathcal{S}(X_a)$. Cette fonction possède de plus la propriété que 0 n'appartient pas au support de sa transformée de Fourier. En utilisant la décomposition $x_a = r\omega_a + x_a^{'}$ associée à $X_a = I\!R\omega_a + H_{\omega_a}$ où H_{ω_a} est l'hyperplan orthogonal à ω_a, on a :

$$h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}(x_a) = h_R^{\omega_a}(x_a^{'})\hat{g}(r).$$

Comme g est à support dans I_α, il existe un réel $c > 0$ tel que $n_\alpha(\lambda) \geq c$ pour $\lambda \in suppg$ et la transformée de Fourier de $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$ est à support dans $\{(s, \xi_a^{'}); |s| \geq c\}$ $(s, \xi_a^{'}$ étant les variables duales de $r, x_a^{'})$. Il est à noter que c est indépendant de R.

Les propriétés de propagation de $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$ vont être déduites du lemme suivant :

Lemme 3.2.1. *Soit $u \in \mathcal{S}(I\!R^n)$ $(n \geq 1)$, telle que sa transformée de Fourier soit supportée en dehors de* 0. *Si $\mu > 1$ alors la fonction :*

$$I\!R \ni t \mapsto < x >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_x)} u \in L^2(I\!R_x^n)$$

est intégrable.

Démonstration : voir l'annexe C. □

Grâce à ce lemme 3.2.1, on a la :

Proposition 3.2.2. *Soit $\mu > 1$. Pour tout R, la fonction :*

$$t \mapsto < x_a >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_a)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} \in L^2(X_a)$$

est intégrable. Si $\mu > \frac{n+1}{2}$ alors la limite :

$$\lim_{R \to \infty} < x_a >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_a)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$$

existe dans $L^2(X_a)$ et la fonction :

$$t \mapsto \lim_{R \to \infty} < x_a >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_a)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$$

est aussi intégrable.

Démonstration : voir l'annexe C. □

3.3 Théorèmes optiques.

Pour des potentiels réguliers, décroissant suffisamment à l'infini, l'existence de la section efficace totale σ_α, pour une direction d'incidence fixée et pour un canal α à deux amas, l'énergie de ce canal appartenant au spectre discret, est établie dans [RW] en dehors des seuils et on en donne une expression faisant intervenir la valeur au bord de la résolvante $\tilde{R}$ de $\tilde{P}$. Le résultat est basé sur un théorème d'absorption limite pour $\tilde{R}$ dû à [PSS]. Cependant, on préfère ici déduire l'existence de σ_α du théorème d'absorption limite 2.5.4 (qui généralise le théorème 2.2.6), valable seulement dans une certaine bande d'énergie, puisqu'une telle restriction en énergie sera imposée lors de l'estimation semi-classique (cf.

partie 5). De plus, il n'est pas nécessaire de retirer tous les seuils de P présents dans cette bande d'énergie pour obtenir cette existence (cf. remarque 2.2.8). Le canal α en question vérifie les hypothèses des paragraphes 1.1 et 2.5. En ce qui concerne la section efficace totale σ_α^{AD}, on obtient un résultat analogue (sans restriction en énergie) à l'aide du théorème 2.5.3 (qui lui généralise le théorème 2.1.6).

On se place dans la situation du paragraphe 2.5. En particulier, les résultats des parties 1 et 2 sont valables. On suppose que les potentiels vérifient l'estimation (3.1 ;3), c'est-à-dire l'hypothèse (D_ρ), pour $\rho > \frac{n+1}{2}$. Comme au paragraphe 3.2, on considère un canal stable $\alpha = (a, E_\alpha, \tilde{\phi}_\alpha)$, où a est une décomposition en deux amas comme celle du paragraphe 1.1, E_α est l'une des valeurs propres E_j du spectre discret de P^a qui vérifient l'hypothèse de stabilité (HS) du paragraphe 1.2. On suppose de plus que l'on a $E_\alpha < \inf \sigma(Q^{AD})$ (cf. remarque 2.2.7). Comme les opérateurs P et $\tilde{P}$ sont reliés par un changement de coordonnées, les résultats des parties 1 et 2 sont valables pour $\tilde{P}$, en particulier le théorème d'absorption limite 2.5.4 s'applique à la résolvante $\tilde{R}$ de $\tilde{P}$.

Etant donné ω_a dans $\mathbb{S}_a$, on impose à $\lambda > E_\alpha$ d'être en dehors de $\sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$ de façon à pouvoir utiliser ce théorème 2.5.4. On a alors le théorème "optique" suivant :

Théorème 3.3.1. *Sous l'hypothèse (D_ρ), pour $\rho > \frac{n+1}{2}$, pour $E_\alpha < \lambda < \inf \sigma(Q^{AD})$ et $\lambda \notin \sigma_p(P)$, pour $\omega_a \in \mathbb{S}_a$, la section efficace $\sigma_\alpha(\lambda, \omega_a)$ existe, est une fonction continue de λ et vérifie :*

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega_a) = \frac{1}{n_\alpha(\lambda)} \Im < \tilde{R}(\lambda + i0)\tilde{I}_a\tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a\tilde{e}_\alpha >_X,$$

où $n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_\alpha)^{1/2}$, $\tilde{e}_\alpha = e^{in_\alpha(\lambda)<x_a,\omega_a>_q}\tilde{\phi}_\alpha(x^a)$ et $< \cdot, \cdot >_X$ désigne le produit scalaire dans $L^2(X)$.

Remarque 3.3.2. *Dans [RW], on a le même résultat, la condition "$\lambda \notin \sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$" étant remplacée par "$\lambda$ n'est pas un seuil de $\tilde{P}$". Rappelons que l'ensemble des seuils de $\tilde{P}$ est défini par :*

$$\bigcup_{c \in \mathcal{A}} \sigma_{pp}(\tilde{P}^c).$$

La différence entre les deux résultats provient seulement de celle existant entre les théorèmes d'absorption limite utilisés (cf. remarque 2.2.8). On reprend donc la preuve de [RW].

Démonstration : On établit l'égalité suivante, qui justifie le nom du théorème :

$$\sum_\beta ||\tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^\omega g_\omega||_b^2 = -2\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} h_R^\omega g_\omega, h_R^\omega g_\omega >_a .$$

Soit $f \in L^2(X_a)$. On a :

$$\begin{aligned}
\sum_\beta ||\tilde{T}_{\beta\alpha} f||_b^2 &= \sum_{\beta \neq \alpha} < \tilde{S}_{\beta\alpha} f, \tilde{S}_{\beta\alpha} f >_b + < (\tilde{S}_{\alpha\alpha} - I)f, (\tilde{S}_{\alpha\alpha} - I)f >_a \\
&= \sum_\beta < \tilde{S}_{\beta\alpha} f, \tilde{S}_{\beta\alpha} f >_b + < f, f >_a \\
&\quad -2\Re < \tilde{S}_{\alpha\alpha} f, f >_a .
\end{aligned}$$

Notons que la quantité $< \tilde{S}_{\alpha\alpha} f, \tilde{S}_{\alpha\alpha} f >_a$ n'est forcément égale à $< f, f >_a$ car $Im\tilde{\Omega}_+^\alpha$ et $Im\tilde{\Omega}_-^\alpha$ sont a priori distincts. L'orthogonalité des canaux permet d'écrire :

$$\alpha \neq \beta \Longrightarrow < (\tilde{\Omega}_\pm^\alpha)^* f, (\tilde{\Omega}_\pm^\beta)^* f >_X = 0$$

donc on peut faire la transformation suivante :

$$\begin{aligned} \sum_\beta < \tilde{S}_{\beta\alpha} f, \tilde{S}_{\beta\alpha} f >_b &= \sum_\beta < (\tilde{\Omega}_+^\beta)^* \tilde{\Omega}_-^\alpha f, (\tilde{\Omega}_+^\beta)^* \tilde{\Omega}_-^\alpha f >_b \\ &= < \left(\sum_\beta \tilde{\Omega}_+^\beta \right)^* \tilde{\Omega}_-^\alpha f, \left(\sum_\beta \tilde{\Omega}_+^\beta \right)^* \tilde{\Omega}_-^\alpha f >_b . \end{aligned}$$

Or la complétude des opérateurs d'onde de canaux signifie que :

$$\bigoplus_\beta Im\tilde{\Omega}_+^\beta = \mathcal{H}_{ac}(P) = \bigoplus_\beta Im\tilde{\Omega}_-^\beta.$$

Par conséquent, on a :

$$\sum_\beta < \tilde{S}_{\beta\alpha} f, \tilde{S}_{\beta\alpha} f >_b = < \tilde{\Omega}_-^\alpha f, \tilde{\Omega}_-^\alpha f >_X$$

et, puisque $\tilde{\Omega}_-^\alpha$ est une isométrie partielle sur $L^2(X_a)$, cette quantité n'est autre en fait que : $< f, f >_a$. On obtient donc :

$$\sum_\beta ||\tilde{T}_{\beta\alpha} f||_b^2 = -2\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} f, f >_a .$$

Notons par u la fonction $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$. D'après la proposition 1.2.4 et la proposition 3.2.2, l'application :

$$t \mapsto \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u$$

est intégrable. On a donc :

$$\begin{aligned} < \tilde{T}_{\alpha\alpha} u, u >_a &= - < (\tilde{\Omega}_-^\alpha)^* \int_{I\!R} e^{it\tilde{H}} i \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u dt, \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X \\ &= - \int_{I\!R} < e^{it\tilde{H}_a} i (\tilde{\Omega}_-^\alpha)^* \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u, \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X dt \end{aligned}$$

$$= - \int_{I\!R} < i e^{it\tilde{H}_a} \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u, \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X dt$$

$$- \int_{I\!R} < e^{it\tilde{H}_a} \int_0^{+\infty} e^{is\tilde{H}_a} \tilde{I}_a e^{-is\tilde{H}} ds\, \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u, \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X dt.$$

On obtient :

$$\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} u, u >_a = - \int_{I\!R} \Im < \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u, e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X dt$$

$$- \int_{I\!R} \int_0^{+\infty} \Re < e^{-is\tilde{H}} \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u, \tilde{I}_a e^{-i(s+t)\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha u >_X dsdt$$

et le premier terme est clairement nul puisque $\tilde{I}_a$ est symétrique. On a donc :

$$\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}, h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} >_a = -\int_{I\!R} \int_0^{+\infty} \Re < e^{-is\tilde{H}} \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}, \tilde{I}_a e^{-i(s+t)\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} >_X dsdt.$$

En utilisant la transformation de Fourier et le fait que $\rho > \frac{n+1}{2}$, on voit qu'à t et λ fixés, on a :

$$\begin{array}{rcl} < x_a >^{-\rho} e^{-it(-\Delta_a + E_\alpha)} h_R^{\omega_a} \tilde{f}_\alpha & \to & < x_a >^{-\rho} e^{-it\lambda} \tilde{f}_\alpha, \\ R & \to & \infty \end{array}$$

dans $L^2(X_a)$, où $\tilde{f}_\alpha = e^{in_\alpha(\lambda) < x_a, \omega_a >_q}$. Par convergence dominée, on a donc, ponctuellement en t :

$$\begin{array}{rcl} < x_a >^{-\rho} e^{-it(-\Delta_a + E_\alpha)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} & \to & \dfrac{1}{2\pi^{1/2}} \displaystyle\int_{I\!R} e^{-it\lambda} < x_a >^{-\rho} \tilde{f}_\alpha \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}} d\lambda \\ R & \to & \infty \end{array}$$

dans $L^2(X_a)$. Comme $||\tilde{I}_a \tilde{\phi}_\alpha||_{L^2(X^a)} = O(< x_a >^{-\rho})$ (cf. proposition 1.2.4), on a la convergence suivante dans $L^2(X)$:

$$\begin{array}{rcl} \tilde{I}_a e^{-it\tilde{H}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} & \to & \dfrac{1}{2\pi^{1/2}} \displaystyle\int_{I\!R} e^{-it\lambda} \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}} d\lambda. \\ R & \to & \infty \end{array}$$

Encore par convergence dominée, on a donc, d'après la proposition 3.2.2, l'existence de la limite :

$$\lim_{R\to\infty} \Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} h_R^\omega g_\omega, h_R^\omega g_\omega >_a \equiv \Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} g_\omega, g_\omega >_a$$

et sa valeur :

$$-\frac{1}{4\pi} \Re \int_{I\!R_t} \int_0^{+\infty} < \int e^{-it\lambda} e^{-is\tilde{H}} \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda) \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}} d\lambda, \int e^{-i(s+t)\mu} \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\mu) \frac{g(\mu)}{n_\alpha(\mu)^{1/2}} d\mu >_X dsdt.$$

On utilise maintenant la formule de Plancherel généralisée, on obtient donc :

$$\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} g_\omega, g_\omega >_a =$$

$$-\frac{1}{2} \Re \int_{I\!R_\lambda} \int_0^{+\infty} < e^{-is(\tilde{H}-\lambda)} \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda), \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda) >_X \frac{|g(\lambda)|^2}{n_\alpha(\lambda)} dsd\lambda.$$

Or, on a :

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle\int_0^{+\infty} < e^{-is(\tilde{H}-\lambda)} \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X ds & = & \displaystyle\lim_{\epsilon\to 0} < \int_0^{+\infty} e^{-\epsilon s - is(\tilde{H}-\lambda)} ds \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X \\ & = & -i \displaystyle\lim_{\epsilon\to 0} < \tilde{R}(\lambda + i\epsilon) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X \\ & = & -i < \tilde{R}(\lambda + i0) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X \end{array}$$

car $< x_a >^s \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha \in L^2(X)$ pour $1/2 < s < \rho - n/2$ et grâce au théorème 2.5.4. On en déduit donc que :

$$\Re < \tilde{T}_{\alpha\alpha} g_\omega, g_\omega >_a = -\frac{1}{2} \Im \int_{I\!R} < \tilde{R}(\lambda + i0) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X \frac{|g(\lambda)|^2}{n_\alpha(\lambda)} d\lambda,$$

ce qui prouve l'existence de la distribution $\sigma_\alpha(\cdot, \omega_a)$ et qu'elle coïncide avec la fonction :

$$\lambda \mapsto \frac{1}{n_\alpha(\lambda)} \Im < \tilde{R}(\lambda + i0) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda), \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda) >_X,$$

qui est continue d'après le théorème 2.5.4. $\square$

On a un théorème analogue pour la section efficace totale adiabatique σ_α^{AD}, définie au paragraphe 3.2, avec le même canal α. Précisons les notations. On pose $\phi_\alpha = U^a \tilde{\phi}_\alpha$. Pour tout $\omega \in S^{n-1}$, on pose $h_R^\omega g_\omega = U_a h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$ où $\omega_a = u_a(h\omega)$. Comme l'opérateur $V^{AD} \equiv P^{AD} - P_a$ est d'ordre 2, on choisit h_R^ω de la forme :

$$h_R^\omega(x) = h^\omega(x/R)$$

pour tout $x \in H_\omega$, l'hyperplan orthogonal à ω, avec $h^\omega \in \mathcal{S}(H_\omega)$ et $h^\omega(0) = 1$. On a :

$$h_R^\omega g_\omega(x) = c_a(h) h^{-n/2} h_R^\omega(x - (x \cdot \omega)\omega) \hat{g}(h^{-1} x \cdot \omega),$$

pour $x \in I\!R^n$.

Théorème 3.3.3. *Pour $\lambda > E_\alpha$, $\lambda \notin \sigma_p(P^{AD})$ et $\omega \in S^{n-1}$, la section efficace $\sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h)$ existe, est une fonction continue de λ et vérifie :*

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h) h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \Im < R^{AD}(\lambda + i0; h) V^{AD} e_\alpha, V^{AD} e_\alpha >,$$

où $n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_\alpha)^{1/2}$, $e_\alpha(x, y) = e^{ih^{-1} n_\alpha(\lambda) x \cdot \omega} \phi_\alpha(y)$, $V^{AD} = P^{AD} - P_a$ et où $C(h)$ tend vers $C \neq 0$ lorsque $h \to 0$ ($C(h) = c_a(h)^2$).

Démonstration : On reprend les étapes de la preuve du théorème 3.3.1. Montrons tout d'abord :

$$||T^{AD} h_R^\omega g_\omega \phi_\alpha||^2 = -2\Re < T^{AD} h_R^\omega g_\omega \phi_\alpha, h_R^\omega g_\omega \phi_\alpha >$$

où $T^{AD} = S^{AD} - \Pi_0$. Soit $f \in L^2(I\!R_x^n)$, on a :

$$\begin{aligned} ||T^{AD} f \phi_\alpha||^2 &= < S^{AD} f \phi_\alpha, S^{AD} f \phi_\alpha > + < f, f >_{L^2(I\!R_x^n)} \\ &\quad -2\Re < S^{AD} f \phi_\alpha, f \phi_\alpha > . \end{aligned}$$

D'après la complétude de $\Omega_\pm^{AD}$, on en déduit que :

$$< S^{AD} f \phi_\alpha, S^{AD} f \phi_\alpha > = < f, f >_{L^2(I\!R_x^n)}$$

d'où :

$$||(S^{AD} - \Pi_0) f \phi_\alpha||^2 = -2\Re < T^{AD} f \phi_\alpha, f \phi_\alpha > .$$

Précisons maintenant l'opérateur $V^{AD}\Pi_\alpha = (P^{AD} - P_a)\Pi_\alpha$. On a :

$$\begin{aligned} V^{AD}\Pi_\alpha &= \Pi(-h^2\Delta_x)\Pi\Pi_\alpha - (-h^2\Delta_x)\Pi_\alpha \\ &\quad +\Pi(P^a + I_a)\Pi_\alpha - P^a\Pi_\alpha \\ &= \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\Pi_\alpha + (\Pi - \Pi_0)(-h^2\Delta_x)\Pi_\alpha \\ &\quad +(\Pi - \Pi_0)E_\alpha\Pi_\alpha + \Pi I_a\Pi_\alpha \end{aligned}$$

car $\Pi_\alpha = \Pi_0\Pi_\alpha$ et $[-h^2\Delta_x, \Pi_0] = 0$. En notant $h_R^\omega g_\omega$ par u, on a :

$$\begin{aligned} V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}u\phi_\alpha &= <x>^\rho (\Pi - \Pi_0)\phi_\alpha \ <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x)}(E_\alpha u - h^2\Delta u) \\ &+ <x>^\rho \Pi 2ih(\nabla_x\Pi)\phi_\alpha\cdot <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x)}ih(\nabla_x u) \\ &- <x>^\rho \Pi h^2(\Delta_x\Pi)\phi_\alpha \ <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x)}u \\ &+ <x>^\rho \Pi I_a\phi_\alpha \ <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x)}u. \end{aligned}$$

D'après la proposition 1.2.4, on peut appliquer le lemme 3.2.1 à chacun des termes de $V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}u\phi_\alpha$, avec $\mu = \rho$. L'application :

$$t \mapsto V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}u\phi_\alpha$$

est donc intégrable. En reprenant les calculs de la preuve du théorème 3.3.1, on obtient :

$$\Re < T^{AD}u\phi_\alpha, u\phi_\alpha >= -\int_{I\!R} \Im < V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}u\phi_\alpha, e^{-it(-h^2\Delta_x)}u\phi_\alpha > dt$$

$$-\int_{I\!R}\int_0^{+\infty} \Re < e^{-isP^{AD}}V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}u\phi_\alpha, V^{AD}e^{-i(s+t)(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}u\phi_\alpha > dsdt$$

et le premier terme disparaît puisque l'opérateur V^{AD} est symétrique. Comme dans la preuve du théorème 3.3.1, on voit qu'à t et λ fixés, on a :

$$\begin{aligned} <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}h_R^\omega f_\alpha &\to <x>^{-\rho} e^{-it\lambda}f_\alpha, \\ R &\to \infty \end{aligned}$$

dans $L^2(I\!R^n)$, où $f_\alpha = e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda)x\cdot\omega}$. Par convergence dominée, on a donc, ponctuellement en t :

$$\begin{aligned} <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}h_R^\omega g_\omega &\to \frac{c_a(h)h^{-n/2}}{2(\pi)^{1/2}}\int_{I\!R} e^{-it\lambda} <x>^{-\rho} f_\alpha\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}d\lambda \\ R &\to \infty \end{aligned}$$

dans $L^2(I\!R^n)$. Comme $Rih\nabla h_R^\omega$ et $R^2(-h^2)\Delta h_R^\omega$ ont la même décroissance en $x - (x\cdot\omega)\omega$ que h_R^ω et tendent aussi vers 1 lorsque $R \to \infty$, on a de même :

$$\begin{aligned} <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}(ih\nabla_x)h_R^\omega g_\omega &\to -\frac{c_a(h)h^{-n/2}}{2(\pi)^{1/2}}\int_{I\!R} e^{-it\lambda}n_\alpha(\lambda)\omega <x>^{-\rho} f_\alpha\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}d\lambda, \\ R &\to \infty \\ <x>^{-\rho} e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}(-h^2\Delta_x)h_R^\omega g_\omega &\to \frac{c_a(h)h^{-n/2}}{2(\pi)^{1/2}}\int_{I\!R} e^{-it\lambda}n_\alpha(\lambda)^2 <x>^{-\rho} f_\alpha\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}d\lambda \\ R &\to \infty \end{aligned}$$

dans $L^2(I\!R^n)$. En vertu de l'expression précédente de $V^{AD}\Pi_\alpha$ et en utilisant la proposition 1.2.4, on a la convergence suivante, dans $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$:

$$\begin{array}{ccc} V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x+E_\alpha)}h^\omega_R g_\omega\phi_\alpha & \to & \dfrac{c_a(h)h^{-n/2}}{2(\pi)^{1/2}}\displaystyle\int_{I\!R} e^{-it\lambda}V^{AD}e_\alpha\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}d\lambda. \\ R & \to & \infty \end{array}$$

Par convergence dominée, on a l'existence de la limite :

$$\lim_{R\to+\infty}\Re < T^{AD}h^\omega_R g_\omega, h^\omega_R g_\omega >_a \equiv \Re < T^{AD}g_\omega, g_\omega >_a$$

et elle vaut :

$$-\frac{c_a(h)^2h^{-n}}{4\pi}\Re\int_{I\!R_t}\int_0^{+\infty} < \int e^{-it\lambda}e^{-isP^{AD}}V^{AD}e_\alpha(\lambda)\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}d\lambda, \int e^{-i(s+t)\mu}V^{AD}e_\alpha(\mu)\frac{g(\mu)}{n(\mu)^{1/2}}d\mu > dsdt.$$

Grâce au fait que $< x >^s V^{AD}e_\alpha \in L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$ pour $1/2 < s < \rho - n/2$ et au théorème 2.5.3, on obtient, en utilisant une formule de Plancherel généralisée comme dans la preuve du théorème 3.3.1, l'existence, la continuité en λ et l'expression suivante de σ^{AD}_α :

$$\sigma^{AD}_\alpha(\lambda,\omega;h) = \frac{c_a(h)^2h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)}\Im < R^{AD}(\lambda+i0)V^{AD}e_\alpha(\lambda), V^{AD}e_\alpha(\lambda) > .$$

$\square$

Remarque 3.3.4. *En utilisant le fait que $e^{in_\alpha(\lambda)\frac{x\cdot\omega}{h}}$ est une valeur propre généralisée de $-h^2\Delta_x$ et ϕ_α une valeur propre de P^a, on obtient :*

$$I_a e_\alpha = (P-\lambda)e_\alpha$$

d'une part et :

$$V^{AD}e_\alpha = \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha + \lambda(\Pi-\Pi_0)e_\alpha = (P^{AD}-\lambda)e_\alpha$$

d'autre part.

Détaillons la deuxième égalité (l'autre est claire). On a :

$$\begin{aligned} P^{AD}e_\alpha &= \Pi(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha + \Pi(P^a+I_a)e_\alpha \\ &= n_\alpha(\lambda)^2\Pi e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi E_\alpha e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \\ &= \lambda\Pi e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \\ &= \lambda e_\alpha - \lambda\hat{\Pi}e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} V^{AD}e_\alpha &= (P^{AD}-P_a)e_\alpha = P^{AD}e_\alpha - (-h^2\Delta_x+E_\alpha)e_\alpha \\ &= P^{AD}e_\alpha - \lambda e_\alpha. \end{aligned}$$

Remarque 3.3.5. *Les trois termes constituant $V^{AD}e_\alpha$ sont $O(<x>^{-\rho})$ mais l'un d'eux se distingue des deux autres. C'est :*

$$\lambda(\Pi - \Pi_0)e_\alpha = -\lambda\hat{\Pi}\Pi_0 e_\alpha = -\lambda\hat{\Pi}e_\alpha$$

car on a, pour $\lambda \notin \sigma_p(P^{AD})$:

$$R^{AD}(\lambda \pm i0)\lambda(\Pi - \Pi_0)e_\alpha = \hat{\Pi}e_\alpha.$$

Ces affirmations découlent directement de la définition de $\hat{\Pi}$ et du fait que P^{AD} est nul sur $Im\hat{\Pi}$. On déduit de ces deux remarques une proposition utile pour la suite (cf. le paragraphe 5.2) :

Proposition 3.3.6. *Si $\chi \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ et $\lambda > E_\alpha$, $\lambda \notin \sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P^{AD})$, alors on a :*

$$R(\lambda \pm i0; h)\chi I_a e_\alpha = \chi e_\alpha + R(\lambda \pm i0; h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha$$

et :

$$R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\chi V^{AD}e_\alpha = \chi e_\alpha + \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha.$$

De plus, pour $\chi, \theta \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ on a :

$$\Im < R(\lambda \pm i0; h)\chi I_a e_\alpha, \theta I_a e_\alpha > + \Im < R(\lambda \pm i0; h)\theta I_a e_\alpha, \chi I_a e_\alpha >$$

$$= \Im < R(\lambda \pm i0; h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha >$$
$$+ \Im < R(\lambda \pm i0; h)[\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha, [\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha >$$

et :

$$\Im < R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\chi V^{AD}e_\alpha, \theta V^{AD}e_\alpha > + \Im < R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\theta V^{AD}e_\alpha, \chi V^{AD}e_\alpha >$$

$$= \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha >$$
$$+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha >$$

Démonstration : voir l'annexe C. □

3.4 Existence de certaines sections $\sigma_{\beta\alpha}$.

Pour montrer l'existence des sections efficaces totales $\sigma_{\beta\alpha}$, on utilise une représentation spectrale de l'opérateur de diffusion $\tilde{S}_{\beta\alpha}$. Pour obtenir une telle représentation, des difficultés propres au problème à N-corps (avec $N > 2$) interviennent (cf. [W5] et [W6]). De plus, il se peut que certaines sections ne soient pas définies pour tout angle d'incidence (cf. [W5]). On prend pour canal d'entrée le canal stable α du paragraphe 3.3 et on sélectionne certains canaux β de sortie pour lesquels on aura l'existence de la section correspondante pour tout angle d'incidence. Pour les raisons évoquées au début du paragraphe 3.3, on restreint l'énergie dans une bande et on utilise encore le théorème 2.5.4. De nouveau, on introduit des sections efficaces totales adiabatiques $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$, pour certains canaux β de sortie.

On se place dans la situation du paragraphe 2.5. Comme pour le théorème optique, on suppose que les potentiels satisfont l'hypothèse (D_ρ), pour $\rho > \frac{n+1}{2}$. Rappelons que le canal $\alpha = (a, E_\alpha, \tilde{\phi}_\alpha)$ est associé à une décomposition a en deux amas comme celle du paragraphe 1.1, que son énergie E_α est l'une des valeurs propres du spectre discret de P^a qui vérifient l'hypothèse de stabilité (HS) du paragraphe 1.2 et $E_\alpha < \inf \sigma(Q^{AD})$. Représenter spectralement $\tilde{S}_{\beta\alpha}$ consiste à déterminer son action de $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ dans $\tilde{\mathcal{H}}_\beta$, où $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ (respectivement $\tilde{\mathcal{H}}_\beta$) est un espace sur lequel $\tilde{P}_a$ (respectivement $\tilde{P}_b$) est un opérateur de multiplication. Reprenons les notations du paragraphe 3.2 et considérons, pour un canal $\gamma = (c, E_\gamma, \tilde{\phi}_\gamma)$, l'application :

$$\tilde{F}_\gamma : L^2(X_c) \longrightarrow \tilde{\mathcal{H}}_\gamma \equiv L^2(I_\gamma; L^2(\mathbb{S}_c)),$$

qui, à $f \in L^2(X_c)$, associe :

$$(\tilde{F}_\gamma f)(\lambda, \theta_c) = C_\gamma(\lambda) \int_{X_c} e^{-in_\gamma(\lambda) < x_c, \theta_c >_q} f(x_c) dx_c,$$

avec :

$$C_\gamma(\lambda) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (2\pi)^{-n_c/2} (n_\gamma(\lambda))^{(n_c-2)/2}$$

et $n_c = dim X_c$. Il s'agit d'une transformée de Fourier qui vérifie, grâce au choix de C_γ :

$$\forall f \in L^2(X_c),\ ||\tilde{F}_\gamma f||_{\tilde{\mathcal{H}}_\gamma} = ||f||_c.$$

D'après le lemme de Sobolev (cf. [RS2]), $\tilde{F}_\gamma$ définit une famille $\{\tilde{F}_\gamma(\lambda), \lambda \in I_\gamma\}$ d'opérateurs bornés de $L^2_s(X_c)$ dans $L^2(\mathbb{S}_c)$ pour $s > 1/2$ par la relation :

$$(\tilde{F}_\gamma(\lambda) f)(\theta_c) = (\tilde{F}_\gamma f)(\lambda, \theta_c),\ \forall f \in L^2_s(X_c).$$

On a noté par $L^2_s(X_c)$ l'espace à poids $L^2_s(X_c; < x_c >^{2s} dx_c)$. On pose également :

$$\tilde{\mathcal{F}}_\gamma = \tilde{F}_\gamma \tilde{\mathcal{J}}_\gamma^* \in \mathcal{L}(L^2(X); \tilde{\mathcal{H}}_\gamma) \text{ et } \tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda) = \tilde{F}_\gamma(\lambda) \tilde{\mathcal{J}}_\gamma^* \in \mathcal{L}(L^2_s(X); \tilde{\mathcal{H}}_\gamma), \text{ pour } s > 1/2.$$

De plus, ces opérateurs $\tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda)$ et $\tilde{F}_\gamma(\lambda)$ sont fortement continus en λ. L'opérateur $\tilde{\mathcal{F}}_\gamma \tilde{P}_c \tilde{\mathcal{F}}_\gamma$ est l'opérateur de multiplication par λ dans $\tilde{\mathcal{H}}_\gamma$, on a donc une "diagonalisation" de $\tilde{P}_c$. L'opérateur $\tilde{T}_{\beta\alpha} \in \mathcal{L}(L^2(X_a); L^2(X_b))$ vérifie la propriété d'entrelacement suivante :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} \tilde{P}_a = \tilde{P}_b \tilde{T}_{\beta\alpha},$$

qui provient de celle des opérateurs d'onde. On en déduit que l'opérateur $\tilde{F}_\beta \tilde{T}_{\beta\alpha} \tilde{F}_\alpha^*$ est décomposable sous la forme :

$$\int_{I_{\beta\alpha}}^{\oplus} \tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda) d\lambda$$

avec $I_{\beta\alpha} = I_\beta \cap I_\alpha$ et, presque partout sur $I_{\beta\alpha}$:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda) = \tilde{F}_\beta(\lambda) \tilde{T}_{\beta\alpha} \tilde{F}_\alpha(\lambda)^*.$$

Précisons maintenant le canal de sortie. On se limite aux canaux β à deux amas tels que $E_\beta \in \sigma_{disc}(\tilde{P}^b)$. La seconde condition assure la décroissance exponentielle de la fonction propre associée $\tilde{\phi}_\beta$ (cf paragraphe 1.2). Le fait que $\sharp b = 2$ implique que, pour toute décomposition $c \not\subset b$, on ait $b \cup c = a_{max}$ (cf. paragraphe 3.1). D'après la propriété (3.1 ;2), on a donc :

$$\forall c \not\subset b,\, \exists \delta > 0,\, \forall x \in X,\, |x^b|_q + |x^c|_q \geq \delta |x|_q.$$

Ainsi les opérateurs $\tilde{\mathcal{J}}_\beta^* \tilde{I}_b < x_b >^{2s}$ et $< x_b >^s \tilde{\mathcal{J}}_\beta^* \tilde{I}_b < x_a >^s$ sont bornés si $1/2 < s < \rho/2$, grâce à la proposition 1.2.4. L'ensemble des canaux de sortie retenus contient donc tous les canaux $(a, E_\beta, \tilde{\phi}_\beta)$ pour $E_\beta \in \sigma_{disc}(\tilde{P}^a)$ et, en particulier, le canal α. L'opérateur $\tilde{\mathcal{J}}_\alpha^* \tilde{I}_a < x_a >^s$ est donc borné si $1/2 < s < \rho/2$.

On montre maintenant le théorème d'existence suivant :

Théorème 3.4.1. *On suppose satisfaite l'hypothèse (D_ρ), pour $\rho > \frac{n+1}{2}$. Soient α le canal stable du paragraphe 3.2 et β un canal à deux amas tel que $E_\beta \in \sigma_{disc}(\tilde{P}^b)$. Pour $E_\alpha < \lambda < \inf \sigma(Q^{AD})$, $\lambda \notin \sigma_p(P)$, pour tout $\omega_a \in \mathbb{S}_a$, la section efficace $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a)$ existe, est une fonction continue de λ et est donnée par :*

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a) = \frac{\pi}{n_\alpha(\lambda)} ||\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(\tilde{I}_a - \tilde{I}_b \tilde{R}(\lambda + i0)\tilde{I}_a)\tilde{e}_\alpha||_{sb}^2 \mathbb{1}_{I_\beta}(\lambda),$$

avec $n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_\alpha)^{1/2}$, $\tilde{e}_\alpha = e^{in_\alpha(\lambda) < x_a, \omega_a >_q} \tilde{\phi}_\alpha(x^a)$ et où $|| \cdot ||_{sb}$ désigne la norme dans $L^2(\mathbb{S}_b)$, $\mathbb{1}_{I_\beta}$ la fonction caractéristique de l'intervalle $I_\beta =]E_\beta; +\infty[$.

Remarque 3.4.2. *Dans le cas où l'énergie E_β n'est pas un seuil de $\tilde{P}^b$ et où λ évite les seuils de $\tilde{P}$, ce résultat est contenu dans [W5]. La preuve qui suit reprend les arguments de [W5].*

Démonstration : On découpe la preuve en plusieurs étapes.

Première étape : On commence par représenter $\tilde{T}_{\beta\alpha}$. Pour tenir compte de la restriction en énergie, prenons un ouvert $I_0 \subset I_\alpha$ ne rencontrant pas $\sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$, deux fonctions $\theta, \Theta \in C_0^\infty(I_\alpha)$ dont le support ne rencontre pas non plus $\sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$, telles que θ vaut 1 sur I_0 et Θ vaut 1 sur le support de θ. On va représenter l'opérateur :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha}^\theta \equiv \Theta(-\Delta_b + E_\beta)\tilde{T}_{\beta\alpha}\theta(-\Delta_a + E_\alpha) = \tilde{T}_{\beta\alpha}\theta(-\Delta_a + E_\alpha).$$

Soient $f_c \in \mathcal{S}(X_c)$ pour $c = a, b$. On pose $g_a = \theta(-\Delta_a + E_\alpha)f_a$ et $g_b = \Theta(-\Delta_b + E_\alpha)f_b$. Compte tenu des propriétés de décroissance en $< x_a >$ de $\tilde{I}_a \tilde{\mathcal{J}}_\alpha$, on a l'intégrabilité de l'application $t \mapsto \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a$ (cf. lemme 3.2.1). D'après l'orthogonalité des canaux (cf. [RS3]), on peut écrire :

$$\begin{aligned} < \tilde{T}_{\beta\alpha}^\theta f_a, f_b >_b &= < (\tilde{\Omega}_+^\beta)^* (\tilde{\Omega}_-^\alpha - \tilde{\Omega}_+^\alpha) g_a, g_b >_b \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} < e^{it\tilde{P}} \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha g_a, \tilde{\Omega}_+^\beta g_b >_X dt \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} < \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha g_a, \tilde{\Omega}_+^\beta e^{-it(-\Delta_b + E_\beta)} g_b >_X dt, \end{aligned}$$

grâce à la propriété d'entrelacement pour les opérateurs d'onde (cf. [RS3]). On a donc :

$$\begin{aligned} < \tilde{T}^{\theta}_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} < \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha g_a, e^{-it\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_X dt \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} < \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha g_a, e^{is\tilde{P}} \tilde{I}_b e^{-i(s+t)\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_X dsdt. \end{aligned}$$

En utilisant la transformation $\tilde{\mathcal{F}}_\alpha$ et le fait que l'opérateur $\tilde{\mathcal{J}}_\alpha^* \tilde{I}_a < x_a >^s$ est borné pour $1/2 < s < \rho/2$, on obtient :

$$< \tilde{T}^{\theta}_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{I_\alpha} e^{-it\lambda} \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda) \tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a, \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda) \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_{sa} d\lambda dt$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{I_\alpha} e^{-it\lambda} \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda) \tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a, \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda) \tilde{I}_a e^{is\tilde{P}} \tilde{I}_b e^{-i(s+t)\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_{sa} d\lambda dsdt.$$

Comme $f_a \in \mathcal{S}(X_a)$, on peut écrire :

$$< \tilde{T}^{\theta}_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{I_\alpha} e^{-it\lambda} \theta(\lambda) < \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, e^{-it\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_X d\lambda dt$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{I_\alpha} e^{-it\lambda} \theta(\lambda) < \tilde{I}_b e^{-is\tilde{P}} \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, e^{-i(s+t)\tilde{P}_b} \tilde{\mathcal{J}}_\beta g_b >_X d\lambda dsdt.$$

On introduit de même $\tilde{\mathcal{F}}_\beta$ en utilisant le fait que $f_b \in \mathcal{S}(X_b)$ et que $\tilde{\mathcal{J}}_\beta^* \tilde{I}_b < x_b >^s$ est borné pour $1/2 < s < \rho/2$, et on trouve :

$$< \tilde{T}^{\theta}_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b =$$

$$-i \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{I_\alpha} \int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)} \Theta(\mu) \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu) \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, \tilde{F}_\beta(\mu) f_b >_{sb} d\mu d\lambda dt$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{I_\alpha} \int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)} \Theta(\mu) \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu) \tilde{I}_b e^{-is(\tilde{P}-\mu)} \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, \tilde{F}_\beta(\mu) f_b >_{sb} d\mu d\lambda dsdt.$$

Grâce à la propriété d'entrelacement des opérateurs d'onde, l'égalité précédente peut s'écrire de même en remplaçant $e^{-is(\tilde{P}-\mu)}$ par $e^{-is(\tilde{P}-\mu)}\Theta(\tilde{P})$. Le théorème 2.5.4 signifie que le poids $< x_a >^{-s}$, pour $s > 1/2$, est localement $\tilde{P}$-lisse sur le support de Θ et donc que l'application :

$$s \mapsto < x_a >^{-s} e^{-is(\tilde{P}-\mu)} \Theta(\tilde{P}) < x_a >^{-s}$$

est intégrable. Puisque $< x_b >^s \tilde{\mathcal{J}}_\beta^* \tilde{I}_b < x_a >^s$ et $< x_a >^{2s} \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{J}}_\alpha$ sont bornés pour $1/2 < s < \rho/2$, le second terme de $< \tilde{T}^{\theta}_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b$ s'écrit donc, par convergence dominée, $-\int_{-\infty}^{+\infty} I(t) dt$ où $I(t)$ est la limite de :

$$\int_0^{+\infty} e^{-s\epsilon} \int_{I_\alpha} \int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)} \Theta(\mu) \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu) \tilde{I}_b e^{-is(\tilde{P}-\mu)} \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, \tilde{F}_\beta(\mu) f_b >_{sb} d\mu d\lambda ds,$$

lorsque $\epsilon \to 0$. On transforme $I(t)$ en :

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_{I_\alpha} \int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)} \Theta(\mu) \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu) \tilde{I}_b \int_0^{+\infty} e^{-is(\tilde{P}-\mu-i\epsilon)} ds \, \tilde{I}_a \tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^* \tilde{F}_\alpha(\lambda) f_a, \tilde{F}_\beta(\mu) f_b >_{sb} d\mu d\lambda$$

$$
\begin{aligned}
&= -i \lim_{\epsilon\to 0} \int_{I_\alpha}\int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)}\Theta(\mu)\theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_b\tilde{R}(\mu+i\epsilon)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb} d\mu d\lambda \\
&= -i \int_{I_\alpha}\int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)}\Theta(\mu)\theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_b\tilde{R}(\mu+i0)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb} d\mu d\lambda.
\end{aligned}
$$

Pour obtenir cette dernière égalité, on utilise encore le fait que $< x_b >^s \tilde{\mathcal{J}}_\beta^* \tilde{I}_b < x_a >^s$ et $< x_a >^{2s} \tilde{I}_a\tilde{\mathcal{J}}_\alpha$ sont bornés pour $1/2 < s < \rho/2$ et le théorème 2.5.4 puisque l'on a $supp\Theta \cap (\sigma(Q^{AD}) \cup \{E_\alpha\} \cup \sigma_p(P)) = \emptyset$. On a donc :

$$< \tilde{T}^\theta_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b =$$

$$-i\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{I_\alpha}\int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)}\Theta(\mu)\theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb} d\mu d\lambda dt$$

$$+i\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{I_\alpha}\int_{I_\beta} e^{-it(\lambda-\mu)}\Theta(\mu)\theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_b\tilde{R}(\mu+i0)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb} d\mu d\lambda dt.$$

Toujours par convergence dominée, on introduit maintenant un facteur convergeant $e^{-\epsilon|t|}$ et les intégrales en t deviennent :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\epsilon|t|}e^{-it(\lambda-\mu)}dt,$$

qui converge, au sens des mesures, vers $2\pi\delta(\lambda-\mu)$ lorsque $\epsilon \to 0$. Or, les applications :

$$
\begin{aligned}
(\lambda,\mu) &\mapsto\ < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb} \\
(\lambda,\mu) &\mapsto\ < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\mu)\tilde{I}_b\tilde{R}(\mu+i0)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\mu)f_b >_{sb}
\end{aligned}
$$

sont continues car $\tilde{\mathcal{J}}_\beta^*\tilde{I}_b\tilde{R}(\mu+i0)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{J}}_\alpha^*$ est continue en norme d'après le théorème 2.5.4 et grâce à la continuité forte des transformations $\tilde{F}_\alpha(\lambda)$ et $\tilde{F}_\beta(\mu)$. On a donc :

$$
\begin{aligned}
< \tilde{T}^\theta_{\beta\alpha} f_a, f_b >_b &= -2i\pi \int_{I_{\beta\alpha}} \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\lambda)f_b >_{sb} d\lambda \\
&\quad +2i\pi \int_{I_{\beta\alpha}} \theta(\lambda) < \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)\tilde{I}_b\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{I}_a\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\,\tilde{F}_\alpha(\lambda)f_a, \tilde{F}_\beta(\lambda)f_b >_{sb} d\lambda.
\end{aligned}
$$

L'opérateur $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ est donc représenté sur I_0 par :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda) = -2i\pi\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(\tilde{I}_a - \tilde{I}_b\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{I}_a)\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*\mathbb{1}_{I_\beta}(\lambda). \qquad (3.4;1)$$

Deuxième étape : pour étudier la limite :

$$\lim_{R\to\infty} ||\tilde{T}_{\beta\alpha}h_R^{\omega_a}g_{\omega_a}||_b^2$$

pour $g \in C_0^\infty(I_0)$, il suffit d'étudier la limite :

$$\lim_{R\to\infty} ||\tilde{T}^\theta_{\beta\alpha}h_R^{\omega_a}g_{\omega_a}||_b^2. \qquad (3.4;2)$$

En effet, vérifions que l'on a, pour $g \in C_0^\infty(I_0)$:

$$\lim_{R\to\infty} (1-\theta(-\Delta_a+E_\alpha))h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} = 0$$

dans $L^2(X_a)$.

La transformée de Fourier de $\theta(-\Delta_a+E_\alpha)h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$ au point $\xi_a = s\omega_a + \xi_a^{'}$ (décomposition associée à $X_a^{'} = I\!R\omega_a \oplus H_{\omega_a}^{'}$, $X_a^{'}$ étant le dual de X_a et $H_{\omega_a}^{'}$ étant l'hyperplan orthogonal à ω_a) est donnée par :

$$c(1-\theta(|\xi_a|^2+E_\alpha))(\tilde{\mathcal{F}}h_R^{\omega_a})(\xi_a^{'})\frac{g(s^2+E_\alpha)}{s^{1/2}}$$

(où $\tilde{\mathcal{F}}h_R^{\omega_a}$ est la transformée de Fourier de $h_R^{\omega_a}$). Comme $g \in C_0^\infty(I_0)$ et $\theta = 1$ sur I_0, il existe $\delta > 0$ tel que, pour $|\xi_a^{'}| < \delta$, on ait :

$$s^2 + E_\alpha \in suppg \Longrightarrow \theta(|\xi_a|^2+E_\alpha) = 1.$$

On en déduit le résultat en remarquant que $\tilde{\mathcal{F}}h_R^{\omega_a}$ tend vers la masse de Dirac en 0 de l'hyperplan $H_{\omega_a}^{'}$.

Troisième étape : On montre que la limite (3.4 ;2) existe. Pour $g \in C_0^\infty(I_0)$, on a :

$$||\tilde{T}_{\beta\alpha}^{\theta} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_b^2 = \int_{I_0\cap I_\beta} ||\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda)\tilde{F}_\alpha(\lambda)h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_{sb}^2 d\lambda. \tag{3.4;3}$$

Pour $\rho^{'} < \rho - 1/2$, l'opérateur :

$$< x_b >^s \tilde{\mathcal{J}}_\beta^*(\tilde{I}_a - \tilde{I}_b\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{I}_a)\tilde{\mathcal{J}}_\alpha < x_a >^{\rho^{'}}$$

est borné pour $1/2 < s < \rho - \rho^{'}$. En notant par $H^\delta(\mathbb{S}_a)$ l'espace de Sobolev d'ordre δ sur la sphère $\mathbb{S}_a$, $\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*$ est borné de $H^{\delta+s}(\mathbb{S}_a)$ dans $L_\delta^2(X_a)$ pour tout δ et tout $s > 1/2$, on en déduit que $\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda)$ est borné de $H^{-\rho^{'}+s}(\mathbb{S}_a)$ dans $L^2(\mathbb{S}_b)$ pour $1/2 < s < \rho - \rho^{'}$. Or, on a, au sens des distributions :

$$\tilde{F}_\alpha(\lambda)g_{\omega_a} = c\frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}\delta_{sa}(\cdot - \omega_a)$$

où $\delta_{sa}(\cdot - \omega_a)$ est la masse de Dirac de la sphère $\mathbb{S}_a$ au point ω_a, $\tilde{F}_\alpha(\lambda)g_{\omega_a} \in H^{-\delta}(\mathbb{S}_a)$ pour $\delta > dim\mathbb{S}_a/2 = \frac{n-1}{2}$ et la convergence suivante dans $H^{-\delta}(\mathbb{S}_a)$:

$$\lim_{R\to\infty} \tilde{F}_\alpha(\lambda)h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} = \tilde{F}_\alpha(\lambda)g_{\omega_a}.$$

En prenant $\rho^{'}$ tel que $n/2 < \rho^{'} < \rho - 1/2$, puis s tel que $1/2 < s < \rho^{'} - \frac{n-1}{2}$ et enfin $\delta = \rho^{'} - s$ (ce qui est possible car $\rho > \frac{n+1}{2}$), on en déduit que la limite :

$$\lim_{R\to\infty} ||\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda)\tilde{F}_\alpha(\lambda)h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_{sb}^2$$

existe sur $I_0 \cap I_\beta$ et que l'on peut appliquer le théorème de convergence dominée dans l'intégrale (3.4 ;3) (car $g \in C_0^\infty(I_0)$). On a donc l'existence de la limite (3.4 ;2).

Quatrième étape : on calcule maintenant cette limite (3.4 ;2). Pour effectuer le calcul, on reprend la méthode temporelle utilisée dans la première étape. On a :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{J}}_\beta^* e^{it\tilde{P}_b} \left(-i - \int_0^{+\infty} e^{is\tilde{P}_b} \tilde{I}_b e^{-is\tilde{P}} ds \right) \tilde{I}_a e^{-it\tilde{P}_a} \tilde{\mathcal{J}}_\alpha h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} dt.$$

dans $L^2(X_b)$. D'après les arguments de la preuve du théorème 3.3.1, on obtient :

$$\lim_{R\to\infty} \tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{J}}_\beta^* e^{it\tilde{P}_b} \left(-i - \int_0^{+\infty} e^{is\tilde{P}_b} \tilde{I}_b e^{-is\tilde{P}} ds \right) \tilde{I}_a \frac{1}{2\pi^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-it\mu} \tilde{e}_\alpha^g(\mu) \frac{g(\mu)}{n_\alpha(\mu)^{1/2}} d\mu dt$$

et grâce aux propriétés précédentes, on a, pour $\lambda \in I_0 \cap I_\beta$:

$$\lim_{R\to\infty} \tilde{F}_\beta(\lambda) \tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda) e^{it\lambda} \left(-i - \int_0^{+\infty} e^{is\lambda} \tilde{I}_b e^{-is\tilde{P}} ds \right) \tilde{I}_a \frac{1}{2\pi^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-it\mu} \tilde{e}_\alpha^g(\mu) \frac{g(\mu)}{n_\alpha(\mu)^{1/2}} d\mu dt$$

$$= \pi^{1/2} \tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda) \left(-i - \tilde{I}_b \int_0^{+\infty} e^{-is(\tilde{P}-\lambda)} ds \right) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha^g(\lambda) \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}}.$$

On en déduit que :

$$\lim_{R\to\infty} \int_{I_0\cap I_\beta} ||\tilde{F}_\beta(\lambda) \tilde{T}_{\beta\alpha} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a}||_{sb}^2 d\lambda = \pi \int_{I_0\cap I_\beta} ||\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(1 - \tilde{I}_b \tilde{R}(\lambda + i0)) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda)||_{sb}^2 \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda)^{1/2}} d\lambda$$

ce qui donne l'expression annoncée de $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a)$. De plus, d'après les arguments précédents, la fonction :

$$\lambda \mapsto ||\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(1 - \tilde{I}_b \tilde{R}(\lambda + i0)) \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha(\lambda)||_{sb}^2$$

est continue sur $I_0 \cap I_\beta$. □

Comme on l'a annoncé au début du paragraphe 3.2, on va vérifier maintenant que les sections efficaces totales dont on vient de montrer l'existence, coïncident avec celles définies à partir de l'amplitude de diffusion (cf. [AJS]). Pour ces sections efficaces totales, on justifie le calcul formel présenté dans [RW].

Proposition 3.4.3. *Sous les hypothèses du théorème 3.4.1, l'opérateur* $\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{S}_a); L^2(\mathbb{S}_b))$ *est dans la classe d'Hilbert-Schmidt pour* $\lambda \notin \sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$. *En notant par* $t_{\beta\alpha}(\lambda; \cdot, \cdot)$ *son noyau, il existe une fonction* $N_\alpha(\lambda)$ *telle que l'on ait :*

$$\int_{I_\alpha} \sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a) |g(\lambda)|^2 d\lambda = \int_{I_\alpha} N_\alpha(\lambda) |g(\lambda)|^2 ||t_{\beta\alpha}(\lambda; \cdot, \omega_a)||_{sb}^2 d\lambda$$

pour toute fonction $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$ *à support disjoint de* $\sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$. *On a noté par* $|| \cdot ||_{sb}$ *la norme de* $L^2(\mathbb{S}_b)$.

Remarque 3.4.4. *En s'appuyant sur [W5], on peut vérifier que cette proposition et la preuve qui suit sont valables dans les conditions considérées dans la remarque 3.4.2.*

Démonstration : D'après la relation (3.4 ;1) et la propriété de décroissance à l'infini de l'opérateur $\tilde{I}_a(x_a,\cdot)\tilde{\mathcal{J}}_\alpha$, il suffit, pour prouver la première assertion, que l'opérateur $< x_a >^{-\mu} \tilde{F}_\alpha(\lambda)^*$ soit dans la classe d'Hilbert-Schmidt pour $\mu > n/2$ et $\lambda \notin \sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$. Pour $f \in \mathcal{S}(X_a)$ et pour $\theta_a \in \mathbb{S}_a$, on a :

$$\tilde{F}_\alpha(\lambda)(< x_a >^{-\mu} f)(\theta_a) = C_\alpha(\lambda) \int_{X_a} e^{-in_\gamma(\lambda)< x_a,\theta_a >_q} < x_a >^{-\mu} f(x_a)dx_a = \int_{X_a} K_\alpha(\lambda;\theta_a,x_a)f(x_a)dx_a$$

avec :

$$K_\alpha(\lambda;\theta_a,x_a) = e^{-in_\gamma(\lambda)< x_a,\theta_a >_q} < x_a >^{-\mu} .$$

Comme $\mu > n/2$, la fonction $K_\alpha(\lambda;\theta_a,\cdot) \in L^2(X_a)$. De plus, l'application $\theta_a \in \mathbb{S}_a \mapsto K_\alpha(\lambda;\theta_a,\cdot) \in L^2(X_a)$ est continue. On en déduit que $K_\alpha(\lambda;\cdot,\cdot) \in L^2(\mathbb{S}_a \times X_a)$. Par conséquent, $\tilde{F}_\alpha(\lambda) < x_a >^{-\mu}$ est dans la classe d'Hilbert-Schmidt et il en est de même de son adjoint $< x_a >^{-\mu} \tilde{F}_\alpha(\lambda)^*$. Notons, au passage, que l'on a aussi la continuité de l'application : $\theta_a \in \mathbb{S}_a \mapsto t_{\beta\alpha}(\lambda;\cdot,\theta_a) \in L^2(\mathbb{S}_b)$.

Comme on l'a vu dans la troisième étape de la preuve du théorème 3.4.1, on peut trouver une fonction $N_{\alpha,1}(\lambda)$ telle que, pour toute fonction $g \in C_0^\infty(I_\alpha)$ à support disjoint de $\sigma(Q^{AD}) \cup \sigma_p(P)$, on ait :

$$(\tilde{F}_\alpha(\lambda)g_{\omega_a})(\lambda,\theta_a) = N_{\alpha,1}(\lambda)\delta_{sa}(\theta_a - \omega_a)g(\lambda)$$

dans $H^{-\delta}(\mathbb{S}_a)$ pour tout $\delta > \frac{n-1}{2}$. Or, pour δ assez proche de $\frac{n-1}{2}$, $\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda)$ est borné de $H^{-\delta}(\mathbb{S}_a)$ dans $L^2(\mathbb{S}_b)$. On en déduit que :

$$\begin{aligned} ||\tilde{T}_{\beta\alpha}g_{\omega_a}||_b^2 &= \int_{I_\alpha} ||\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda)\tilde{F}_\alpha(\lambda)g_{\omega_a}||_{sb}^2 d\lambda \\ &= \int_{I_\alpha} N_{\alpha,1}(\lambda)^2|g(\lambda)|^2|| < t_{\beta\alpha}(\lambda;\theta_b,\theta_a), \delta_{sa}(\theta_a - \omega_a) >_{sa} ||_{sb}^2 d\lambda \end{aligned}$$

d'après la continuité de $\theta_a \mapsto t_{\beta\alpha}(\lambda;\cdot,\theta_a)$. On a donc :

$$||\tilde{T}_{\beta\alpha}g_{\omega_a}||_b^2 = \int_{I_\alpha} N_\alpha(\lambda)|g(\lambda)|^2||t_{\beta\alpha}(\lambda;\cdot,\omega_a)||_{sb}^2 d\lambda$$

avec $N_\alpha(\lambda) = N_{\alpha,1}(\lambda)^2$, ce qui donne l'égalité annoncée. $\square$

Montrons maintenant l'existence des sections efficaces totales adiabatiques que l'on a définies au paragraphe 3.2. Le théorème 3.4.1 est basé sur la représentation spectrale de l'opérateur de transition $\tilde{T}_{\beta\alpha} = \tilde{S}_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}$. Dans le cas où l'énergie E_β du canal β est l'une des énergies du spectre discret, considérées au paragraphe 2.5, on va montrer qu'une telle représentation existe pour l'opérateur $T_{\beta\alpha}^{AD} \equiv \Pi_\beta(S^{AD} - \Pi_0)\Pi_\alpha$ et qu'on en déduit une expression de la section efficace totale $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$. Cette expression sera utile pour approximer semi-classiquement la section $\sigma_{\beta\alpha}$ correspondante (cf. paragraphe 5.3).

Avant d'énoncer le résultat, précisons quelques notations. On reprend la situation décrite au début de ce paragraphe 3.4. A partir de l'application :

$$F_\gamma : L^2(I\!R^n) \longrightarrow L^2(I_\gamma; L^2(S^{n-1})),$$

$(\gamma = \alpha, \beta)$ qui, à $f \in L^2(I\!R^n)$, associe :

$$(F_\gamma f)(\lambda, \theta) = C_\gamma(\lambda, h) \int_{I\!R^n} e^{-ih^{-1}n_\gamma(\lambda)x\cdot\theta} f(x)dx,$$

avec $C_\gamma(\lambda, h) = C_\gamma(\lambda)h^{-n/2}$, on construit de même une famille $\{F_\gamma(\lambda), \lambda \in I_\gamma\}$ d'opérateurs bornés de $L^2_s(I\!R^n)$ dans $L^2(S^{n-1})$, pour $s > 1/2$, par la relation :

$$(F_\gamma(\lambda)f)(\theta) = (F_\gamma f)(\lambda, \theta), \forall f \in L^2_s(I\!R^n).$$

De plus, ces opérateurs $F_\gamma(\lambda)$ sont fortement continus en λ et ils diagonalisent l'opérateur $-h^2\Delta_x + E_\gamma$. On définit aussi les opérateurs $\mathcal{F}_\gamma(\lambda) = F_\gamma(\lambda)\Pi_\gamma$ qui sont bornés de $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ dans $L^2(S^{n-1}_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ et fortement continus en λ. On a le résultat suivant :

Théorème 3.4.5. *On suppose l'hypothèse (D_ρ) vérifiée pour $\rho > \frac{n+1}{2}$. Soient α le canal stable du paragraphe 3.2 d'énergie E_α et β un canal du type précédent. Pour $\lambda > E_\alpha, E_\beta$, $\lambda \notin \sigma_p(P^{AD})$, l'opérateur de transition $T^{AD}_{\beta\alpha}$ se représente spectralement sous la forme :*

$$T^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda) = -2i\pi\mathcal{F}_\beta(\lambda)(\Pi V^{AD} - (V^{AD})^*\Pi R^{AD}(\lambda + i0)V^{AD})\mathcal{F}_\alpha(\lambda)^*$$

et, pour tout $\omega \in S^{n-1}$, la section efficace totale $\sigma^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda, \omega)$ existe et est une fonction continue de λ donnée par :

$$\sigma^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda, \omega) = \frac{C(h)h^{-n}\pi}{n_\alpha(\lambda)}||\mathcal{F}_\beta(\lambda)(\Pi V^{AD} - (V^{AD})^*\Pi R^{AD}(\lambda + i0)V^{AD})e_\alpha||^2,$$

avec $n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_\alpha)^{1/2}$, $e_\alpha = e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda)x\cdot\omega}\phi_\alpha(y)$ et $V^{AD} = P^{AD} - P_a$.

Démonstration : On montre que l'on peut reprendre la preuve du théorème 3.4.1. Considérons la première étape. Pour $f \in \mathcal{S}(I\!R^n)$, l'application :

$$t \mapsto V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}f\phi_\alpha$$

est intégrable, comme on l'a vu dans la preuve du théorème 3.3.3. Comme on a $P^{AD}\hat{\Pi} = 0$, on peut écrire :

$$\Pi\Omega^{AD}_\pm = \Omega^{AD}_\pm.$$

On en déduit que :

$$\begin{aligned} < \tilde{T}^{AD,\theta}_{\beta\alpha} f_1, f_2 >_b &= -i\int_{-\infty}^{+\infty} < \Pi V^{AD}e^{-itP_a}g_1\phi_\alpha, e^{-itP_a}g_2\phi_\alpha >_X dt \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{+\infty} < \Pi V^{AD}e^{-itP_a}g_1\phi_\alpha, e^{isP^{AD}}\Pi V^{AD}e^{-i(s+t)P_a}g_2\phi_\alpha >_X dsdt \end{aligned}$$

pour $f_1, f_2 \in \mathcal{S}(I\!R^n)$, $g_1 = \theta(-h^2\Delta_x + E_\alpha)f_1$ et $g_2 = \Theta(-h^2\Delta_x + E_\alpha)f_2$ et pour :

$$T^{AD,\theta}_{\beta\alpha} \equiv \Theta(-h^2\Delta_x + E_\beta)T^{AD}_{\beta\alpha}\theta(-h^2\Delta_x + E_\alpha) = \tilde{T}_{\beta\alpha}\theta(-h^2\Delta_x + E_\alpha).$$

En écrivant $\Pi V^{AD}\Pi_0$ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Pi V^{AD}\Pi_0 &= \Pi(-h^2\Delta_x)(\Pi - \Pi_0)\Pi_0 + \Pi I_a \Pi_0 \\ &= \Pi(\Pi - \Pi_0)(-h^2\Delta_x)\Pi_0 + \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\Pi_0 + \Pi I_a\Pi_0, \end{aligned}$$

on a, pour tout $f \in \mathcal{S}(I\!R^n)$:

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}_\alpha(\lambda)(\Pi V^{AD})^* < x >^s f)(\theta) &= (F_\alpha(\lambda) < x >^{-s} \Pi_0 < x >^{2s} I_a \Pi f)(\theta) \\ &+ (F_\alpha(\lambda) < x >^{-s} \Pi_0 < x >^{2s} (\lambda - E_\alpha)(\Pi - \Pi_0)\Pi f)(\theta) \\ &- (F_\alpha(\lambda) < x >^{-s} \Pi_0 < x >^{2s} (\nabla_x \Pi)\Pi f)(\theta) \cdot 2hn_\alpha(\lambda)\theta \\ &- (F_\alpha(\lambda) < x >^{-s} \Pi_0 < x >^{2s} h^2(\Delta_x\Pi)\Pi f)(\theta). \end{aligned}$$

On en déduit que l'opérateur $< x >^s \Pi V^{AD}\mathcal{F}_\alpha(\lambda)^*$ est borné pour $1/2 < s < \rho/2$ et est fortement continu en λ. Le terme correspondant avec $\mathcal{F}_\beta$ possède les mêmes propriétés. Par conséquent, on peut reprendre les arguments de la preuve du théorème 3.4.1 et obtenir la représentation spectrale pour $T^{AD}_{\beta\alpha}$. Il est à noter que l'énergie vérifie seulement : $\lambda > E_\alpha, E_\beta$ et $\lambda \notin \sigma_p(P^{AD})$, puisque l'on utilise cette fois le théorème 2.5.3. Les deuxième et troisième étapes sont identiques à celles de la preuve du théorème 3.4.1. Quant à la quatrième étape, on utilise le calcul de la limite :

$$\lim_{R\to\infty} V^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x + E_\alpha)}h^\omega_R g_\omega \phi_\alpha$$

effectué dans la preuve du théorème 3.3.3 et on obtient l'existence, la continuité et la formule annoncées. $\square$

4 Estimation semi-classique des résolvantes.

Pour l'étude de l'approximation de Born-Oppenheimer, on doit tenir compte du paramètre h dans les propriétés précédentes. On reprend notamment l'estimation semi-classique de la résolvante R de P obtenue dans [KMW1] mais dans un cas plus général. Le résultat est basé sur la construction d'une fonction fuite globale au sens de [GM] pour plusieurs hamiltoniens classiques. On verra dans le paragraphe 4.5 que cette construction s'applique aussi à un opérateur de Schrödinger matriciel et on étudiera le cas de l'opérateur de Dirac avec champ électrique scalaire.

4.1 Dépendance en h.

Dans ce paragraphe, on se propose de préciser le rôle du paramètre semi-classique h dans les propriétés de l'hamiltonien électronique $P_e(x;h)$. On suppose que les potentiels vérifient la condition (D_ρ) pour un réel $\rho > 0$. Rappelons que $P_e(x;h) = P^a(h) + I_a(x;h)$ où $P^a(h)$ et $I_a(x;h)$ sont donnés par (1.1 ;1) et (1.1 ;2) respectivement. Pour $h = 0$, on a donc $P_e(x;0) = P^a(0) + I_a(x;0)$ avec :

$$P^a(0) = \sum_{k=1}^{2} \left[\sum_{j \in A'_k} (-\frac{1}{2}\Delta_{y_j} + V_{kj}(y_j)) + \frac{1}{2} \sum_{l,j \in A'_k} V_{lj}(y_l - y_j) \right]$$

et :

$$\begin{aligned} I_a(x;0) \quad &= \quad \sum_{l \in A'_1, j \in A'_2} V_{lj}(y_l - y_j + x) + \sum_{l \in A'_1} V_{l2}(x + y_l) \\ &\quad + \sum_{j \in A'_2} V_{1j}(x - y_j) + V_{12}(x), \end{aligned}$$

En comparant avec les hamiltoniens à N-corps généralisés où le paramètre semi-classique est la constante de Planck (cf. [RW], par exemple), on constate deux différences essentielles avec le cas qui nous occupe. D'une part, notre paramètre h apparaît dans le terme de Hughes-Echart de l'hamiltonien intra-amas P^a (cf. (1.1 ;1)) et d'autre part, il intervient dans le potentiel inter-amas I_a (cf. (1.1 ;2)).

D'après l'expression (1.1 ;1), la première différence se traduit par le fait que : $P^a(h) \to P^a(0)$, lorsque $h \to 0$, en norme des résolvantes. Pour voir cela, il suffit de remarquer que les opérateurs :

$$\partial_{y_r,s}\partial_{y_k,l} \left(\sum_j (-\Delta_{y_j}) + i \right)^{-1}$$

sont bornés ($\partial_{y_r,s}$ étant la dérivation par rapport à la s-ième coordonnée de la variable y_r). On a même, pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$:

$$||(z - P^a(h))^{-1} - (z - P^a(0))^{-1}|| = O(h^2), \tag{4.1;1}$$

uniformément en z, si la distance de z au spectre de $P^a(h)$ est uniformément minorée (en z et h).

Comme dans le paragraphe 1.2, prenons $E_0 \in \sigma_{disc}(P^a(0))$ une valeur propre de $P^a(0)$ de multiplicité finie m. D'après la convergence en norme des résolvantes précédente, il existe exactement, pour h assez petit, m valeurs propres de $P^a(h)$, $e_1(h), \ldots, e_m(h)$, chacune répétée autant que sa multiplicité, qui convergent vers E_0 quand $h \to 0$. Supposons maintenant que E_0 vérifie l'hypothèse de stabilité (HS) (cf. 1.2). On note par $\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)$ les valeurs propres de $P_e(x;0)$ qui convergent vers E_0 lorsque $|x| \to \infty$. A-t-on une situation analogue pour h assez petit ? En raison de la présence de h dans le potentiel inter-amas I_a, il faut certainement renoncer à une convergence en norme des résolvantes : $P_e(x;h) \to P_e(x;0)$ $(h \to 0)$. Cependant, comme on le verra à la fin de ce paragraphe (cf. proposition 4.1.3), la situation précédente sera préservée pour h assez petit si les "trous" dans le spectre de $P_e(x;0)$ persistent dans celui de $P_e(x;h)$ pour h petit et si la partie de ce spectre, qui est proche de E_0 pour $|x|$ grand, est de multiplicité m.

Précisons ces deux conditions. Pour la première, rappelons qu'il existe, par hypothèse (cf. 1.2), un $\delta > 0$, pour lequel $P_e(x;0)$ vérifie la propriété suivante :

$$\forall x \in I\!R^n,\ d(\{\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)\}, \sigma(P_e(x;0)) \setminus \{\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)\}) \geq \delta. \qquad (H_\delta)$$

Pour ce même δ, on fait l'hypothèse $(H_\delta)'$ suivante : il existe des fonctions $e_\pm$ et $E_\pm$ vérifiant $e_-(x) < E_-(x) < e_+(x) < E_+(x)$, pour tout x, et :

$$\inf_{x \in I\!R^n} |E_\pm(x) - e_\pm(x)| \geq \delta$$

telles que l'on ait :

$$\forall x \in I\!R^n,\ \lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0) \in]E_-(x); e_+(x)[.$$

De plus, on peut trouver un réel $h_\delta > 0$ tel que l'on ait, pour $h \leq h_\delta$:

$$\sigma(P_e(x;h)) \cap ([e_-(x); E_-(x)] \cup [e_+(x); E_+(x)]) = \emptyset.$$

Cette hypothèse de séparation est analogue à l'hypothèse (1.8) de [KMW2]. Pour la seconde, on considère le même δ et on suppose qu'il existe un $R_0 > 0$ et un $h_\delta > 0$ tels que, pour $|x| \geq R_0$ et $h \in [0; h_\delta]$, on ait :

$$dim\, Im(1\!\!1_{]E_-(x);e_+(x)[}(P_e(x;h))) = m. \qquad (H_\delta)''$$

Notons que, compte tenu de la proposition 1.2.1, ces conditions constituent en fait une hypothèse de stabilité sur les $e_j(h)$.

On dira que la valeur propre E_0 vérifie l'**hypothèse de stabilité semi-classique** $(HS(h))$ si elle vérifie (HS) pour un certain $\delta > 0$ et les hypothèses $(H_\delta)'$ et $(H_\delta)''$ pour ce même δ.

Sous cette hypothèse semi-classique $(HS(h))$, on peut trouver $(\Gamma(x))_{x \in I\!R^n}$, une famille de contours dans $\mathbb{C}$, entourant tous les $\lambda_j(x;0)$, telle que, pour tout $h \in [0; h_\delta]$, on ait :

$$\inf_{x \in I\!R^n} d(\sigma(P_e(x;h)), \Gamma(x)) \geq \delta/2.$$

De plus, comme $\lambda_j(x;0) \to E_0$ $(|x| \to \infty)$, on peut imposer que, pour $|x| \geq R_1 \geq R_0$, on ait :

$$\Gamma(x) = \{z \in \mathbb{C};\ |z - E_0| = \delta/2\} \equiv \Gamma(\infty). \tag{4.1;2}$$

Pour δ et h_δ assez petits, on a donc, pour $h \in [0; h_\delta]$:

$$\Pi_0(h) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma(\infty)} (z - P^a(h))^{-1} dz \tag{4.1;3}$$

et, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\Pi(x;0) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma(x)} (z - P_e(x;0))^{-1} dz, \tag{4.1;4}$$

d'après (H_δ). Grâce à l'hypothèse $(H_\delta)'$, nous pouvons définir, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ et tout $h \in [0; h_\delta]$:

$$\Pi(x;h) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma(x)} (z - P_e(x;h))^{-1} dz, \tag{4.1;5}$$

D'après $(H_\delta)''$, $\Pi(x;h)$ est, pour $|x|$ assez grand, le projecteur spectral associé à un système $\lambda_1(x;h), \ldots, \lambda_m(x;h)$ de valeurs propres de $P_e(x;h)$, de multiplicité totale m. Comme on l'établira dans la proposition 4.1.3, ce système sera globalement défini et très proche de $\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)$.

Avant de retrouver les résultats du paragraphe 1.2 avec une uniformité en h et d'aborder cette proposition 4.1.3, démontrons le lemme suivant :

Lemme 4.1.1. *Sous les hypothèses (D_ρ) $(\rho > 0)$, (H_δ) et $(H_\delta)'$, pour $s > 0$ assez petit, les opérateurs :*

$$e^{s<y>}\Pi_0(h)e^{-s<y>} \ \text{ et } e^{s<y>}\Pi(x;h)e^{-s<y>}$$

sont uniformément bornés sur $L^2(\mathbb{R}_y^{nN})$, pour $x \in \mathbb{R}^n$ et $h \in [0; h_\delta]$.

Démonstration : voir l'annexe D. □

A partir de ce lemme 4.1.1, on est en mesure de donner l'équivalent semi-classique de la proposition 1.2.4 :

Proposition 4.1.2. *Sous les hypothèses (D_ρ) $(\rho > 0)$ et $(HS(h))$, on a les estimations suivantes :*

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||\partial_x^\alpha(\Pi(x;h) - \Pi_0(h))|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}, \tag{4.1;6}$$

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h)|| + ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},$$

et :

$$||\Pi(x;h)P_e(x;h)\Pi(x;h) - \Pi(x;h)P^a(h)\Pi_0(h)|| = O(< x >^{-\rho}), \tag{4.1;7}$$

uniformément pour $h \in [0, h_\delta]$, h_δ assez petit. $|| \cdot ||$ désigne la norme de $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_y^{nN}))$.

Démonstration : La preuve de cette proposition est assez longue. Afin de ne pas surcharger ce paragraphe, les détails sont renvoyés dans l'annexe D. Donnons cependant les ingrédients essentiels de cette preuve. On commence par établir l'estimation :

$$\forall \alpha \in I\!N^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|} \qquad (4.1;8)$$

uniformément pour h assez petit. En utilisant la relation :

$$||\Pi_0(h) - \Pi_0(0)|| = O(h^2), \qquad (4.1;9)$$

on voit que l'on est ramené à estimer :

$$||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h)\Pi_0(0)||.$$

En s'appuyant sur la décroissance exponentielle des fonctions propres de $P^a(0)$, la décroissance des potentiels constituant I_a et le lemme 4.1.1, on en déduit (4.1 ;8). Ensuite, on établit l'estimation suivante :

$$\forall \alpha \in I\!N^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||\partial_x^\alpha(\Pi(x;h) - \Pi_0(h))\Pi_0(h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|} \qquad (4.1;10)$$

uniformément pour h assez petit. Pour ce faire, il suffit d'établir l'estimation pour $|x|$ grand. En utilisant les formules de Cauchy donnant $\Pi_0(h)$ et $\Pi(x;h)$ ((4.1 ;3) et (4.1 ;5)) et les arguments précédents, on obtient (4.1 ;10).

On montre maintenant (4.1 ;6), pour $|x|$ grand. On utilise l'hypothèse de stabilité faite sur les $e_j(h)$ (cf.$(H_\delta)''$) et on reprend les arguments de [K] en suivant la dépendance en h. On obtient, pour $|x|$ assez grand, l'estimation :

$$||\Pi(x;h) - \Pi_0(h)|| \leq 1/2, \qquad (4.1;11)$$

uniformément en h. Cette propriété (4.1 ;11) permet d'établir (4.1 ;6) par récurrence. En partant de la relation :

$$\Pi(x;h) - \Pi_0(h) = (\Pi(x;h) - \Pi_0(h))^2 + (\Pi(x;h) - \Pi_0(h))\Pi_0(h) + \Pi_0(h)(\Pi(x;h) - \Pi_0(h))$$

et grâce à (4.1 ;11), on contrôle la norme de la différence $\Pi(x;h) - \Pi_0(h)$ et celle de ces dérivées par des termes intervenant dans (4.1 ;10).

A partir de (4.1 ;6) et de (4.1 ;8), on montre (4.1 ;7). Pour terminer la preuve, il ne reste plus qu'à établir l'estimation suivante :

$$\forall \alpha \in I\!N^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},$$

uniformément en h. On procède comme pour l'estimation (4.1 ;8). $\square$

Comme on l'a déjà signalé, on va voir que les valeurs propres $\lambda_1(x;h), \ldots, \lambda_m(x;h)$ se prolongent à $I\!R^n$ et que l'on sait les localiser. C'est l'objet de la :

Proposition 4.1.3. *([KMW1]) On suppose que E_0 vérifie l'hypothèse de stabilité semi-classique ($HS(h)$) pour un réel $\delta > 0$. Pour $h \in [0, h_\delta]$, h_δ assez petit, pour tout $x \in I\!R^n$, il existe alors exactement m valeurs propres de $P_e(x; h)$, $\lambda_1(x; h), \ldots, \lambda_m(x; h)$, chacune répétée autant que sa multiplicité, telles que l'on ait, uniformément en x :*

$$\forall j \in < 1, m >, \ \lambda_j(x; h) = \lambda_j(x; 0) + O(h^2)$$

et l'équivalent de la propriété ($H_{\delta/3}$) (cf. paragraphe 1.2) pour $P_e(x; h)$, uniformément pour $h \in [0, h_\delta]$.

Remarque 4.1.4. *La preuve de la proposition 3.1 dans [KMW1] est incorrecte. Dans [KMW2], l'hypothèse (1.8) assure la validité de cette preuve dans le cas où les valeurs propres sont non dégénérées. Dans le cas présent, on utilise l'hypothèse $(H_\delta)'$.*

Démonstration : On détaille la preuve de [KMW1] et on renvoie pour certaines étapes à l'annexe D. Cette proposition est basée sur l'estimation suivante :

$$||\Pi(x; h) - \Pi(x; 0)|| = O(h^2), \text{ uniformément en } x. \qquad (4.1; 12)$$

D'après les relations (4.1 ;4) et (4.1 ;5), on est ramené à étudier, pour $z \in \Gamma(x)$, la différence suivante :

$$(P_e(x; h) - P_e(x; 0))(z - P_e(x; h))^{-1}.$$

Notons tout de suite que l'on a, uniformément en x et $z \in \Gamma(x)$:

$$||HE(z - P_e(x; h))^{-1}|| = O(h^2)$$

(cf. (1.1 ;3)).

Il reste donc à examiner la contribution du potentiel inter-amas I_a. Cette contribution est du type :

$$[V(x + L_h(y) + L(y)) - V(x + L(y))](z - P_e(x; h))^{-1}$$

où $L_h, L \in \mathcal{L}(I\!R^{nN}; I\!R^n)$ avec $||L_h|| = O(h^2)$, L indépendant de h et V vérifie (D_ρ). On pense utiliser une formule de Taylor en h. On voit alors apparaître un terme $L_h(y)$ que l'on va "absorber" en projettant sur $Im\Pi(x; h)$, grâce à la décroissance exponentielle des fonctions propres de $P^a(0)$, associées à la valeur propre E_0 (cf. l'annexe D). On obtient ainsi (4.1 ;12).

Pour h assez petit, $\Pi(x; h)$ et $\Pi(x; 0)$ ont même rang, pour tout $x \in I\!R^n$. $\Pi(x; h)$ est donc le projecteur spectral de $P_e(x; h)$ associé à $\lambda_1(x; h), \ldots, \lambda_m(x; h)$, m valeurs propres, chacune répétée autant que sa multiplicité. L'hypothèse $(H_\delta)'$ implique alors ($H_{\delta/3}$) pour $P_e(x; h)$, uniformément pour $h \in [0, h_\delta]$.

On montre maintenant que les $\lambda_j(x; h)$ sont proches des $\lambda_j(x; 0)$. Des arguments précédents résulte aussi l'estimation suivante :

$$||(P_e(x; h) - P_e(x; 0))\Pi(x; 0)|| + ||(P_e(x; h) - P_e(x; 0))\Pi(x; h)|| = O(h^2),$$

qui permet, conjointement avec (4.1 ;12), d'écrire :

$$||\Pi(x; h)P_e(x; h)\Pi(x; h) - \Pi(x; 0)P_e(x; 0)\Pi(x; 0)|| = O(h^2).$$

En utilisant une formule de "minimax", on obtient le résultat cherché (cf. l'annexe D). □

4.2 Etude semi-classique des résolvantes.

Dans les théorèmes 2.1.6 et 2.2.6, on a montré l'existence de la valeur au bord des résolvantes R^{AD} et R, avec une restriction en énergie pour R. Cependant, on n'a pas précisé la dépendance en h de ces opérateurs. Dans ce paragraphe, on se propose de décrire cette dépendance en supposant l'existence d'un opérateur convenable F^{AD}, conjugué à P^{AD}. Aux paragraphes 4.3 et 4.4, on construira un tel opérateur $F^{AD}(h)$ sous certaines conditions.

Les potentiels vérifient toujours l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > 0$ et on suppose l'hypothèse $(HS(h))$ remplie. On reprend la démarche de la partie 3 de [KMW1]. Supposons que l'on dispose d'un opérateur $F^{AD}(h)$, conjugué de $P^{AD}(h)$, tel que l'on ait :

$$|| \, [[P^{AD}(h), F^{AD}(h)], F^{AD}(h)](P^{AD}(h)+i)^{-1}|| = O(h^2) \qquad (4.2;1)$$

et vérifiant, près d'un point $E \in I\!\!R$, l'estimation de Mourre semi-classique suivante :

$$\chi(P^{AD}(h))i[P^{AD}(h), F^{AD}(h)]\chi(P^{AD}(h)) \geq \alpha h \chi^2(P^{AD}(h)) \qquad (4.2;2)$$

avec $\chi = 1\!\!1_{]E-\delta,E+\delta[}$, $\delta > 0$ et $\alpha > 0$ indépendants de h.

Remarque 4.2.1. *A la différence des estimations de Mourre de la partie 2, l'estimation (4.2;2) interdit la présence de valeur propre de $P^{AD}(h)$ dans l'intervalle $]E-\delta, E+\delta[$, pour h assez petit (cf. [Mo]).*

En reprenant la méthode de Mourre et en suivant la dépendance en h, on établit le théorème suivant :

Théorème 4.2.2. *([KMW1], théorème 3.2) Si l'opérateur $F^{AD}(h)$ vérifie les conditions précédentes près de $E \in I\!\!R$ alors, pour $s > 1/2$, h assez petit et λ assez proche de E, on a :*

$$|| < F^{AD}(h) >^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i0; h) < F^{AD}(h) >^{-s} || = O(h^{-1}).$$

Si, de plus, l'opérateur $< x >^{-1} (P^{AD}(h)+i)^{-1}F^{AD}(h)$ est borné, uniformément en h, alors on a :

$$|| < x >^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i0; h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}). \qquad (4.2;3)$$

Contrairement à la situation de la partie 2, on va déduire de ce théorème une estimation semi-classique de $R(\lambda \pm i0; h)$ pour λ convenable par une méthode de perturbation en h. Notons que, pour cette dernière estimation, on se limite au cas où les potentiels sont à courte portée.

Théorème 4.2.3. *([KMW1], théorème 3.4) Supposons vérifiées les hypothèses (D_ρ) avec $\rho > 1$ et $(HS(h))$, ainsi que l'estimation (4.2;3) près d'un point E tel que :*

$$d(E, \sigma(Q^{AD}(h))) \geq \eta > 0$$

pour h assez petit et η indépendant de h. On a alors :

$$|| < x >^{-s} R(\lambda \pm i0; h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}) \qquad (4.2;4)$$

et :

$$|| < x >^{-s} [R(\lambda \pm i0; h) - \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)] < x >^{-s} || = O(1), \qquad (4.2;5)$$

pour $s > 1/2$ et h assez petit, uniformément pour λ proche de E.

Remarque 4.2.4. *Ce théorème 4.2.3 reprend le théorème 3.4 de [KMW1] et y ajoute l'estimation (4.2 ;5) qui sera utile pour les estimations semi-classiques de la partie 5.*

Démonstration : On pose : $V = P - P^{AD} - Q^{AD}$ (cf. paragraphe 1.2) et on écrit la formule des résolvantes pour P et $P - V$, pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$:

$$(P - z)^{-1} - (P - V - z)^{-1} = -(P - z)^{-1} V (P - V - z)^{-1}$$

soit :

$$R(z; h) = (P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} - R(z; h) V (P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1}.$$

Comme on a :

$$\begin{aligned} \Pi(P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} &= \Pi R^{AD}(z; h), \\ \hat{\Pi}(P^{AD} + Q^{AD} - z)^{-1} &= \hat{\Pi}\hat{R}(z; h), \end{aligned}$$

où $\hat{R}(z; h) = (Q^{AD} - z)^{-1}$, comme on a : $V = \Pi P \hat{\Pi} + \hat{\Pi} P \Pi$, on obtient :

$$R(z; h) = \Pi R^{AD}(z; h) + \hat{\Pi}\hat{R}(z; h) - R(z; h)(\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h) + \Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h)).$$

En remplaçant le terme $R(z; h)$ de droite par le terme à droite de l'égalité, on trouve :

$$\begin{aligned} R(z; h) &= \Pi R^{AD}(z; h) + \hat{\Pi}\hat{R}(z; h) - [\hat{R}(z; h)\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h) + R^{AD}(z; h)\Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h)] \\ &+ R(z; h)[\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h)\Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h) + \Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h)\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h)] \end{aligned}$$

car $\Pi\hat{\Pi} = 0$ (cf. remarque 1.2.6). On note par $B(z; h)$ l'opérateur :

$$\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h)\Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h) + \Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h)\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h)$$

et on va montrer que, pour $1/2 < s < \rho/2$, on a :

$$|| < x >^{s} B(z; h) < x >^{-s} || = O(h) \qquad (4.2;6)$$

pour h petit, uniformément pour $z = \lambda + i\epsilon$, avec $\epsilon_0 \geq |\epsilon| > 0$ et λ proche de E.

En remarquant que :

$$\hat{\Pi} P \Pi = \hat{\Pi} h \nabla_x \cdot h O(< x >^{-\rho}) + \hat{\Pi} h^2 O(< x >^{-\rho})$$

(cf. proposition 4.1.2) et que $\hat{R}(z; h)$ est uniformément borné en z et h grâce à l'hypothèse sur E, on voit que :

$$|| < x >^{s} \Pi P \hat{\Pi}\hat{R}(z; h)\hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z; h) < x >^{-s} || \leq O(h^2) || < x >^{-s} R^{AD}(z; h) < x >^{-s} || = O(h)$$

pour $1/2 < s < \rho$.

Pour estimer l'autre terme, on introduit une troncature $\chi \in C_0^\infty(I\!R)$ telle que $\chi = 1$ sur l'intervalle balayé par λ (troncature en énergie). On a :

$$|| < x >^s \hat{\Pi} P \Pi (1 - \chi(P^{AD})) R^{AD}(z;h) \Pi P \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) < x >^{-s} ||$$

$$\leq || < x >^s \hat{\Pi} P \Pi (1 - \chi(P^{AD})) < x >^{-s} || \cdot || \Pi P \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) || = O(h^2).$$

car $h\nabla_x \Pi R^{AD}(z;h)(1 - \chi(P^{AD}))$ est uniformément borné pour $\Re(z)$ proche de E et est $O(h)$.

Comme $\chi(P^{AD})$ et $h\nabla_x \Pi \chi(P^{AD})$ sont uniformément bornés de $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ dans $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ pour tout s (cf. annexe A), on a :

$$\begin{array}{rcl} || < x >^s \hat{\Pi} P \Pi \chi(P^{AD}) < x >^s || & \leq & || < x >^{2s} hO(< x >^{-\rho}) \cdot < x >^{-s} h\nabla_x \Pi \chi(P^{AD}) < x >^s || \\ & + & || < x >^{2s} h^2 O(< x >^{-\rho}) < x >^{-s} \chi(P^{AD}) < x >^s || \\ & = & O(h) \end{array}$$

pour $1/2 < s < \rho/2$, d'où :

$$|| < x >^s \hat{\Pi} P \Pi \chi(P^{AD}) R^{AD}(z;h) \Pi P \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) < x >^{-s} ||$$

$$\begin{array}{rl} \leq & || < x >^s \hat{\Pi} P \Pi \chi(P^{AD}) < x >^s || \cdot || < x >^{-s} R^{AD}(z;h) < x >^{-s} || \cdot \\ & || < x >^s \Pi P \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) || \\ = & O(h). \end{array}$$

On a donc montré (4.2 ;6) et on peut écrire dans l'espace des applications linéaires continues de $L^2_s(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$ dans $L^2_{-s}(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$:

$$R(z;h)(1 - B(z;h)) = \Pi R^{AD}(z;h) + \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) - (A(z;h) + A(\overline{z};h)^*) \qquad (4.2;7)$$

où $A(z;h) = \hat{R}(z;h) \hat{\Pi} P \Pi R^{AD}(z;h)$, ce qui donne, pour h assez petit :

$$R(z;h) = [\Pi R^{AD}(z;h) + \hat{\Pi} \hat{R}(z;h) - (A(z;h) + A(\overline{z};h)^*)](1 - B(z;h))^{-1}.$$

Grâce aux estimations précédentes, on voit que l'on a :

$$|| < x >^{-s} R(z;h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}).$$

De plus, compte tenu de cette dernière estimation, on en déduit, à partir de (4.2 ;7), que l'on a aussi l'estimation (4.2 ;5). □

Remarque 4.2.5. *Comme dans la remarque 2.2.7, donnons une situation où la condition imposée à E est satisfaite. Sous les hypothèses (D_ρ) $(\rho > 1)$ et $(HS(h))$, si $\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)$ sont les m premières valeurs propres de $P_e(x;0)$ et si l'on a :*

$$E < \inf_{x \in I\!R^n} \inf \sigma(P_e(x;0)) \setminus \{\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)\},$$

alors, grâce à la proposition 4.1.3, la distance de l'énergie E au spectre de $Q^{AD}(h)$ est minorée par un réel strictement positif, uniformément en h.

4.3 Fonction “multi-fuite” globale et opérateur conjugué pour P^{AD}.

A la différence de [KMW1], on autorise la valeur propre E_0 à être dégénérée. Sous une hypothèse de “non-croisement” des valeurs propres $\lambda_j(x;0)$ (définies au paragraphe 4.1), on établit l'existence d'un opérateur F^{AD} satisfaisant les conditions du paragraphe 4.2 en tout point $E \notin \{0, E_0\}$ de non-capture pour les hamiltoniens classiques $p_j(x,\xi) = |\xi|^2+\lambda_j(x;0)$. Pour ce faire, on construit une fonction “multi-fuite” globale c'est-à-dire une fonction qui est, simultanément, une fonction fuite globale en E pour chaque hamiltonien. Comme on le verra à la fin de ce paragraphe (cf. remarque 4.3.6), la situation présente ne fournit pas d'amélioration par rapport à [KMW1] en ce qui concerne la résolvante de P. C'est pourquoi l'on traitera une situation plus générale au paragraphe 4.4.

Tout d'abord, voyons pourquoi l'opérateur A^{AD} considéré au paragraphe 2.1 se révèle insuffisant dans la situation présente. Rappelons que $A^{AD} \equiv \Pi A \Pi$, où :

$$A = \frac{x \cdot h\nabla_x + h\nabla_x \cdot x}{2i}.$$

On a donc :

$$i[P^{AD}, A^{AD}] = \Pi i[-h^2\Delta_x + P_e, A]\Pi + \Pi i[-h^2\Delta_x, \Pi]A\Pi + \Pi A i[-h^2\Delta_x, \Pi]\Pi.$$

Les deux derniers opérateurs donnent modulo “$O(h^2)$” :

$$i\Pi h(\nabla_x \Pi) \cdot h\nabla_x A\Pi + i\Pi A h(\nabla_x \Pi) \cdot h\nabla_x \Pi$$

qui est un opérateur h-pseudo-différentiel de symbole principal :

$$\Pi(x)h(\nabla_x\Pi)(x) \cdot \xi(x\cdot\xi)\Pi(x) + \Pi(x)(x\cdot\xi)h(\nabla_x\Pi)(x)\cdot\xi\Pi(x) = 0$$

car $\Pi(x)(\nabla_x\Pi)(x)\Pi(x) = 0$ (cf. remarque 1.2.6). Il s'agit donc, sur $Im\mathbb{1}_{]E-\delta;E+\delta[}(P^{AD})$ (avec $0, E_0 \notin]E-\delta; E+\delta[$), de contrôler le terme suivant :

$$\begin{aligned}
\Pi i[-h^2\Delta_x + P_e, A]\Pi &= h(2\Pi(-h^2\Delta_x)\Pi - \Pi x\cdot(\nabla_x I_a)\Pi) \\
&= h(2(P^{AD} - E_0)\Pi - \Pi x\cdot(\nabla_x I_a)\Pi - 2\Pi(P_e - E_0)\Pi) \\
&= h(2(P^{AD} - E_0) - \Pi x\cdot(\nabla_x I_a)\Pi - 2\Pi(P_e - E_0)\Pi).
\end{aligned}$$

Ce terme est minoré par ch si E est assez grand. Cette restriction est gênante et imprécise. Remarquons cependant que, pour $E \notin \{0, E_0\}$ donné, la minoration est valable pour $|x|$ assez grand, d'après la proposition 4.1.2. Pour contourner cette difficulté, on va modifier convenablement l'opérateur A pour $|x|$ petit.

Dans le cas où E_0 est non dégénérée, les auteurs de l'article [KMW1] s'appuyent sur la proposition 4.3.1 suivante (cf. [GM]) pour modifier l'opérateur A. On va préciser la forme de la fonction fuite globale de [GM] car elle nous servira pour aborder le cas où E_0 est dégénérée.

Soit V une fonction de $C^\infty(I\!R^n; I\!R)$ bornée inférieurement. On dit que $\lambda_0 \in I\!R$ est une énergie non-captive pour l'hamiltonien classique $p(x,\xi) = |\xi|^2 + V(x)$ si l'on a $p^{-1}(\lambda_0) = \emptyset$ ou bien :

$$\forall (x,\xi) \in p^{-1}(\lambda_0),\ \lim_{t\to+\infty} \Phi^t(x,\xi) = \infty \text{ et } \lim_{t\to-\infty} \Phi^t(x,\xi) = \infty,$$

où Φ^t désigne le flot hamiltonien (complet d'après l'hypothèse sur V) associé à p. On dit qu'une fonction a est une fonction fuite globale pour l'hamiltonien p à l'énergie $\lambda_0 \in I\!R$ s'il existe $C_0 > 0$ et $\epsilon > 0$ tels que a soit C^∞ sur $p^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$ et qu'elle vérifie :

$$\forall (x,\xi) \in p^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[),\ \{p, a\}(x,\xi) \geq C_0,$$

où $\{\cdot,\cdot\}$ désigne le crochet de Poisson. L'intérêt d'une telle fonction a est le suivant : si l'on peut la prolonger à $I\!R^{2n}$ en un symbole, notons par a^w l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl a. Si V est aussi un symbole, en notant par P l'opérateur $-h^2\Delta + V$, l'opérateur :

$$\theta(P) i[P, a^w]\theta(P)$$

est aussi un opérateur h-pseudo-différentiel de symbole principal :

$$\theta^2(p)\{p, a\} \geq C_0\theta^2(p),$$

la fonction θ étant régulière, à support compact proche de λ_0 et valant 1 près de λ_0. Grâce à l'inégalité de Gårding (cf. [Hö]), on en déduit l'inégalité :

$$\theta(P) i[P, a^w]\theta(P) \geq C_0 h\theta(P)^2 - Ch^2 Id.$$

En choisissant une fonction τ régulière telle que $\tau\theta = \tau$, on obtient :

$$\tau(P) i[P, a^w]\tau(P) \geq \frac{C_0}{2} h\tau(P)^2$$

pour h assez petit, c'est-à-dire une estimation de Mourre semi-classique.

Proposition 4.3.1. *([GM]) Si le potentiel V précédent vérifie :*

$$\forall \alpha \in I\!N^n; |\alpha| \leq 1,\ \exists C_\alpha > 0; \forall x \in I\!R^n,\ |\partial_x^\alpha V(x)| \leq C_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},\ (D'_\rho)$$

pour un réel $\rho > 0$, alors, pour toute énergie non-captive $\lambda_0 > 0$, il existe une fonction fuite globale pour $p(x,\xi) = |\xi|^2 + V(x)$.

Démonstration : voir [GM]. $\square$

Remarque 4.3.2. *Signalons que toute énergie λ_0 telle que $\inf V \leq \lambda_0 < 0$ est captive pour cet hamiltonien p puisque la surface d'énergie correspondante $p^{-1}(\lambda_0)$ est compacte et non vide.*

D'autre part, pour $\lambda_0 > 0$, la fonction fuite globale de [GM] est de la forme :

$$x\cdot\xi + \chi(x) f(x,\xi)$$

sur $p^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$*, où* $\chi \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ *et* f *est* C^∞ *sur cet ensemble. Comme l'intersection de cet ensemble avec :*

$$\{(x,\xi);\, x \in supp\chi\}$$

est compact, on peut prolonger la fonction f *en une fonction* C^∞ *sur* $I\!R^{2n}$ *de sorte que* χf *appartiennent à* $C_0^\infty(I\!R^{2n}; I\!R)$*. On prolonge ainsi la fonction a. En particulier, l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl* χf *est borné sur* $L^2(I\!R^n)$ *(cf. le théorème de Calderon-Vaillancourt dans [Ro]).*

Construisons maintenant une fonction fuite pour plusieurs hamiltoniens classiques :

Proposition 4.3.3. *On considère des potentiels* $(V_j)_{1\le j\le q}$ *de* $C^\infty(I\!R^n; I\!R)$*, vérifiant* $(D_\rho^{'})$ *pour un réel* $\rho > 0$ *et tels que :*

$$j \neq k \Longrightarrow (\forall x \in I\!R^n,\, V_j(x) \neq V_k(x)). \qquad (4.3;1)$$

Si $\lambda_0 > 0$ *est une énergie non-captive pour chaque hamiltonien* $p_j(x,\xi) = |\xi|^2 + V_j(x)$ *alors il existe une fonction qui est simultanément une fonction fuite globale à l'énergie* λ_0 *pour chaque hamiltonien* p_j*.*

Démonstration : D'après la preuve de la proposition 4.3.1, il existe $R > 0$, $C_0 > 0$ et $\epsilon > 0$ tels que, pour tout j, on ait :
- $\{p_j, x\cdot\xi\} \ge \lambda_0$ pour $|x| \ge R$ et $(x,\xi) \in p_j^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$,
- il existe $a_j \in C^\infty(I\!R^{2n})$ de la forme :

$$a_j(x,\xi) = x\cdot\xi + C_j\chi_j(x)f_j(x,\xi)$$

où $C_j > 0$, $\chi_j \in C_0^\infty(I\!R^n)$, $\chi_j f_j \in C_0^\infty(I\!R^{2n})$, et telle que :

$$\{p_j, a_j\} \ge C_0$$

sur $p_j^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$.
Soient $R^{'} \equiv \max_j \sup\{|x|; x \in supp\chi_j\} > R$ et $R^{"} > R^{'}$. Grâce à l'hypothèse de "non-croisement" (4.3 ;1), on va montrer qu'il existe $\alpha > 0$ tel que, pour tout ϵ assez petit, on ait :

$$j \neq k \Longrightarrow d(\{|x| \le R^{"}\}\cap p_j^{-1}(]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[), \{|x| \le R^{"}\}\cap p_k^{-1}(]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[)) \ge \alpha. \quad (4.3;2)$$

On a noté par $\{|x| \le R^{"}\}$ l'ensemble $\{(x,\xi); |x| \le R^{"}\}$. D'après l'hypothèse (4.3 ;1), il existe $\delta > 0$ tel que :

$$|x| \le R^{"} \Longrightarrow (\forall j \neq k,\, |V_j(x) - V_k(x)| \ge \delta).$$

Prenons $\epsilon < \delta/2$. On pose :

$$K = \max_j \sup_{|x|\le R^{"}} |V_j(x)| \text{ et } K_j = \sup_{|x|\le R^{"}} ||V_j^{'}(x)||.$$

Supposons que, pour tous $r, \eta > 0$, il existe $(x, \xi) \in \{|x| \leq R^"\} \cap p_j^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$ et $(x^{'}, \xi^{'}) \in \{|x| \leq R^"\} \cap p_k^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$ pour $j \neq k$ et tels que :

$$|\xi - \xi^{'}| < \eta, \; |x - x^{'}| < r.$$

On a donc :

$$||\xi^{'}|^2 - |\xi|^2| \leq |\xi^{'} - \xi| \cdot |\xi^{'} + \xi| \leq 2\eta(\lambda_0 + \epsilon + K)^{1/2}.$$

D'une part, on a :

$$|V_j(x) - V_k(x^{'})| \leq |p_j(x, \xi) - p_k(x^{'}, \xi^{'})| + ||\xi^{'}|^2 - |\xi|^2| \leq 2\epsilon + 2\eta(\lambda_0 + \epsilon + K)^{1/2}$$

et d'autre part, on a :

$$|V_j(x) - V_k(x^{'})| \geq |V_j(x^{'}) - V_k(x^{'})| - |V_j(x) - V_j(x^{'})| \geq \delta - rK_j.$$

Pour r et η assez petits, on a une contradiction. Par conséquent, il existe un $\alpha > 0$ pour lequel on a (4.3 ;2) pour tout ϵ assez petit.

D'après cette propriété (4.3 ;2), on peut construire une partition de l'unité $(t_j)_{1 \leq j \leq q}$ sur $I\!R^{2n}$ (i.e $\sum t_j = 1$) telle que, pour tout j, $0 \leq t_j \leq 1$, $t_j \in C^\infty(I\!R^{2n})$ et :
– $t_j = 1$ sur $\{|x| \leq R^"\} \cap p_j^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$,
– $t_j = 0$ sur $\{|x| \leq R^"\} \cap p_k^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$ pour tout $k \neq j$.
On pose $a = \sum t_j a_j$ et on vérifie que cette fonction convient. Sur $p_j^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$, on a :

$$\{p_j, a\} = \sum_{k=1}^{q} \{p_j, C_k t_k \chi_k f_k\} + \{p_j, x \cdot \xi\}.$$

Si $|x| \leq R^"$ alors on a :

$$\{p_j, a\} = \{p_j, C_j t_j \chi_j f_j\} + \{p_j, x \cdot \xi\} = \{p_j, a_j\} \geq C_0.$$

Si $|x| > R^"$ alors on a :

$$\{p_j, a\} = \{p_j, x \cdot \xi\} \geq \lambda_0$$

car $R^" > R^{'}$ et pour $|x| > R^{'}$, $x \notin supp\chi_k$, pour tout k. $\square$

L'objectif est d'appliquer cette proposition 4.3.3 aux hamiltoniens $p_j(x, \xi) = |\xi|^2 + \lambda_j(x; 0) - E_0$ (les $\lambda_j(x; 0)$ étant définies au paragraphe 4.1). On fait l'**hypothèse de "non-croisement"** (NC) suivante : les valeurs propres de $P_e(x; 0)$ qui convergent vers E_0 à l'infini sont les :

$$\lambda_1(x; 0) < \cdots < \lambda_q(x; 0), \; \forall x \in I\!R^n,$$

où chaque $\lambda_j(x; 0)$ est de multiplicité constante m_j avec $\sum m_j = m$, la multiplicité de E_0.

Notons que, sous cette hypothèse, il existe pour tout j une famille de contours dans $\mathbb{C}$, $\{\Gamma_j(x), x \in I\!R^n\}$, telle que le projecteur spectral $\Pi_j(x; 0)$ associé à $\lambda_j(x; 0)$ soit donné par la formule de Cauchy :

$$\Pi_j(x; 0) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma_j(x)} (z - P_e(x; 0))^{-1} dz. \qquad (4.3; 3)$$

Comme pour le projecteur $\Pi(x;0)$ (cf. proposition 1.2.3), ce projecteur $\Pi_j(x;0)$ est de classe C^∞ ce qui assurent que $\lambda_j(x;0)$ l'est aussi en vertu de la relation :

$$\lambda_j(x;0) = \frac{1}{m_j} Tr(\Pi_j(x;0)P_e(x;0))$$

où Tr désigne la trace.

Bien que le périmètre des $\Gamma_j(x)$ tend vers 0 quand $|x| \to \infty$, les $\lambda_j(x;0)$ vérifient la condition (D'_ρ) introduite dans la proposition 4.3.1 (il s'agit du ρ de l'hypothèse (D_ρ) vérifiée par les potentiels). Pour confirmer ce point, on va s'appuyer sur [K]. Comme dans la preuve de la proposition 4.1.3, les $\lambda_j(x;0)$ sont, pour $|x|$ assez grand, les valeurs propres de la matrice symétrique $M(x)$ représentant $P_e(x;0)$ dans la base $(\Pi(x;0)\phi_k)_{1\leq k\leq m}$, où $(\phi_k)_{1\leq k\leq m}$ est une base orthonormée de $Im\Pi_0(0)$. Les coefficients $a_{kl}(x)$ de $M(x)$ vérifient l'estimation :

$$|\partial^\alpha(a_{kl}(x) - \delta_{kl})| = O(< x >^{-\rho-|\alpha|})$$

pour tout $\alpha \in I\!N^n$ grâce à la proposition 4.1.2. D'après [K] page 111, les $\lambda_j(x;0)$ vérifient la condition (D'_ρ).

On est en mesure désormais de montrer la :

Proposition 4.3.4. *Sous l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > 0$ pour les potentiels et l'hypothèse de "non-croisement" (NC) pour les valeurs propres $\lambda_j(x;0)$ $(1 \leq j \leq q)$, il existe, pour toute énergie $E \notin \{0, E_0\}$ non-captive pour chaque hamiltonien $p_j(x,\xi) = |\xi|^2 + \lambda_j(x;0)$, un opérateur F^{AD} satisfaisant, pour h assez petit, la propriété (4.2;1) et la propriété (4.2;2) suivante :*

$$\chi(P^{AD}(h))i[P^{AD}(h), F^{AD}(h)]\chi(P^{AD}(h)) \geq \alpha h \chi^2(P^{AD}(h))$$

avec $\chi = 1\!\!1_{]E-\delta,E+\delta[}$, $\delta > 0$ et $\alpha > 0$ indépendants de h.

Démonstration : Compte tenu de la remarque 4.3.2, on peut supposer que $E - E_0 > 0$ car, pour :

$$E < \inf_{x,j} \lambda_j(x;0),$$

on a $\chi(P^{AD}(h)) = 0$ pour δ, h assez petits. On applique la proposition 4.3.3 aux hamiltoniens classiques $p_j(x,\xi) = |\xi|^2 + \lambda_j(x;0) - E_0$ pour l'énergie non-captive $E - E_0 > 0$. On a donc une fonction a qui est une fonction fuite globale en $E - E_0$ pour chaque p_j.

Comme le périmètre des contours $\Gamma_j(x)$, intervenant dans la définition (4.3 ;3) des $\Pi_j(x;0)$, tend vers 0 lorsque $|x| \to \infty$, les projecteurs $\Pi_j(x;h)$ sont bien définis par une formule analogue pour h assez petit en fonction de $|x|$. Les projecteurs $\Pi_j(x;0)$ sont bien défini indépendemment de h mais on ne contrôle pas le comportement à l'infini de leurs dérivées. Pour éviter ces problèmes, on va tronquer tous ces projecteurs à l'infini.

Grâce à la proposition 4.1.2, on peut choisir le réel R qui intervient dans la preuve de la proposition 4.3.3 de sorte que l'on ait :

$$||\Pi(x;h)x \cdot (\nabla_x I_a)(x;h)\Pi(x;h)|| + ||2\Pi(x;h)(P_e(x;h) - E_0)\Pi(x;h)|| \leq E - E_0 \quad (4.3;4)$$

pour $|x| \geq R$, uniformément en h. Soient $\tau_1, \tau_2 \in C^\infty(I\!R^n)$ telles que $\tau_1^2 + \tau_2^2 = 1$. On impose que τ_1 vaille 1 sur $\{x; |x| \leq R'\}$ et soit à support dans $\{x; |x| \leq R"\}$ (R' et $R"$ étant définis dans la preuve de la proposition 4.3.3). D'après l'hypothèse de "non-croisement" (NC), il existe $h_0 > 0$ assez petit tel que, pour tous $|x| \leq R"$ et $h \leq h_0$, les projecteurs $\Pi_j(x; h)$ définis par (4.3 ;3), où l'hamiltonien électronique $P_e(x; 0)$ est remplacé par $P_e(x; h)$, soient C^∞. En notant par a^w l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl a, on pose :

$$F^{AD} = \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1 + \tau_2 \Pi a^w \Pi \tau_2.$$

Grâce aux propriétés de a (cf. remarque 4.3.2), on voit que la propriété (4.2 ;1) est satisfaite. Il s'agit maintenant de vérifier l'estimation de Mourre (4.2 ;2).

On calcule le commutateur $i[P^{AD}, F^{AD}]$ modulo "$O(h^2)$", où "$O(h^2)$" (respectivement "$O(h)$") désignera des opérateurs B P^{AD}-bornés tels que la norme de $B(P^{AD}+i)^{-1}$ soit un $O(h^2)$ (respectivement $O(h)$).

D'une part, on a :

$$\begin{aligned} i[P^{AD}, \tau_2 \Pi a^w \Pi \tau_2] &= \tau_2 \Pi i[P, a^w] \Pi \tau_2 + \Pi i[-h^2\Delta_x, \tau_2 \Pi] a^w \Pi \tau_2 + \tau_2 \Pi a^w i[-h^2 \Delta_x, \tau_2 \Pi] \Pi \\ &= \tau_2 \Pi i[P, a^w] \Pi \tau_2 + \text{“}O(h^2)\text{”} \\ &\quad -2i \Pi h \nabla_x \cdot h(\nabla_x(\tau_2 \Pi)) a^w \Pi \tau_2 - 2i \tau_2 \Pi a^w h(\nabla_x(\tau_2 \Pi)) \cdot h \nabla_x \Pi. \end{aligned}$$

Comme les commutateurs $[\Pi, a^w]$, $[\Pi, h\nabla_x]$ sont "$O(h)$" et d'après la remarque 1.2.6, on a donc :

$$\begin{aligned} i[P^{AD}, \tau_2 \Pi a^w \Pi \tau_2] &= \tau_2 \Pi i[P, a^w] \Pi \tau_2 + \text{“}O(h^2)\text{”} \\ &\quad -2i \Pi h \nabla_x \cdot (h \nabla \tau_2) \Pi a^w \Pi \tau_2 - 2i \tau_2 \Pi a^w \Pi (h \nabla \tau_2) \cdot h \nabla_x \Pi \\ &= \tau_2 \Pi i[P, a^w] \Pi \tau_2 + \text{“}O(h^2)\text{”} \\ &\quad -2i \Pi h \nabla_x \cdot (h \nabla \tau_2) \tau_2 \Pi a^w \Pi - 2i \Pi a^w \Pi \tau_2 (h \nabla \tau_2) \cdot h \nabla_x \Pi \end{aligned}$$

car le commutateur $[\tau_2, a^w]$ est "$O(h)$". D'autre part, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{q} i[P^{AD}, \tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1] &= \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j i[P, a^w] \Pi_j \tau_1 + \text{“}O(h^2)\text{”} + \\ &\quad \sum_{j=1}^{q} (-2i \Pi h \nabla_x \cdot h(\nabla_x(\tau_1 \Pi_j)) a^w \Pi_j \tau_1 - 2i \tau_1 \Pi_j a^w h(\nabla_x(\tau_1 \Pi_j)) \cdot h \nabla_x \Pi). \end{aligned}$$

Les termes contenant $(\nabla_x \Pi_j)$ forment un opérateur h-pseudo-différentiel admissible de symbole principal :

$$-2ih \sum_{j=1}^{q} (\tau_1(x) \Pi(x) h(\nabla_x \Pi_j)(x) \cdot \xi a(x,\xi) \Pi_j(x) \tau_1(x) + \tau_1(x) \Pi_j(x) a(x,\xi) \xi \cdot h(\nabla_x \Pi_j)(x) \Pi(x) \tau_1(x)).$$

Or, comme $\Pi_j^2 = \Pi_j = \Pi_j \Pi = \Pi \Pi_j$, on a :

$$\Pi(\nabla_x \Pi_j) \Pi_j + \Pi_j (\nabla_x \Pi_j) \Pi = \Pi (\nabla_x \Pi_j) \Pi$$

et :

$$\sum_{j=1}^{q} \Pi(\nabla_x \Pi_j)\Pi = \Pi(\nabla_x \Pi)\Pi = 0$$

d'après la remarque 1.2.6. Les termes en question sont donc eux aussi "$O(h^2)$". On peut remarquer que ce fait n'est plus clair si :

$$F^{AD} = \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j a_j^w \Pi_j \tau_1 + \tau_2 \Pi Op_h^w(x \cdot \xi)\Pi \tau_2$$

où, pour tout j, a_j est une fonction fuite globale pour $p_j - E_0$ à l'énergie $E - E_0$ et si les a_j ne sont pas toutes égales a priori (on a noté par $Op_h^w(x \cdot \xi)$ l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl $x \cdot \xi$). On a donc :

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{q} i[P^{AD}, \tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1] &= \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j i[P, a^w]\Pi_j \tau_1 + \text{“}O(h^2)\text{”} + \\
&\quad \sum_{j=1}^{q} (-2i\Pi h\nabla_x \cdot (h\nabla\tau_1)\Pi_j a^w \Pi_j \tau_1 - 2i\tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j (h\nabla\tau_1) \cdot h\nabla_x \Pi).
\end{aligned}$$

En utilisant le fait que $\nabla\tau_1 [a^w, \Pi_j]\tau_1 =$ "$O(h)$", on a :

$$\begin{aligned}
\nabla\tau_1 \Pi a^w \Pi \tau_1 &= \nabla\tau_1 \sum_{j,k} \Pi_j a^w \Pi_k \tau_1 \\
&= \nabla\tau_1 \sum_{j} \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1 + \text{“}O(h)\text{”}.
\end{aligned}$$

Une relation similaire existe pour $\tau_1 \Pi a^w \Pi \nabla\tau_1$. On en déduit que :

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{q} i[P^{AD}, \tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1] &= \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j i[P, a^w]\Pi_j \tau_1 + \text{“}O(h^2)\text{”} \\
&\quad -2i\Pi h\nabla_x \cdot (h\nabla\tau_1)\Pi a^w \Pi \tau_1 - 2i\tau_1 \Pi a^w \Pi (h\nabla\tau_1) \cdot h\nabla_x \Pi \\
&= \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j i[P, a^w]\Pi_j \tau_1 + \text{“}O(h^2)\text{”} \\
&\quad -2i\Pi h\nabla_x \cdot (h\nabla\tau_1)\tau_1 \Pi a^w \Pi - 2i\Pi a^w \Pi \tau_1 (h\nabla\tau_1) \cdot h\nabla_x \Pi.
\end{aligned}$$

car le commutateur $[\tau_1, a^w]$ est "$O(h)$". D'après le choix de τ_1 et τ_2, on a $\tau_1 \nabla\tau_1 + \tau_2 \nabla\tau_2 = 0$. En regroupant les deux calculs précédents, on trouve donc :

$$i[P^{AD}, F^{AD}] = \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j i[P, a^w]\Pi_j \tau_1 + \tau_2 \Pi i[P, a^w]\Pi \tau_2 + \text{“}O(h^2)\text{”}.$$

Dans le deuxième terme, on peut en fait remplacer a^w par $Op_h^w(x \cdot \xi)$ (l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl $x \cdot \xi$) car $\chi_j \tau_2 = 0$, pour tout j.

Soit $\eta > 0$ assez petit tel que $0, E_0 \notin]E - \eta; E + \eta[$ et $\theta \in C^\infty(I\!R; I\!R)$ valant 1 près de E et à support dans $]E - \eta; E + \eta[$. On va minorer $\theta(P^{AD}) i[P^{AD}, F^{AD}]\theta(P^{AD})$. Grâce au calcul fonctionnel d'Helffer-Sjöstrand (cf. [HS]), on va montrer que :

$$[\theta(P^{AD}), \tau_2] = O(h) \tag{4.3;5}$$

et, pour tout j :

$$\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_j - \tau_1\Pi_j\theta(P_j) = O(h), \tag{4.3;6}$$

où $P_j = -h^2\Delta_x + \lambda_j(x;0)$.

D'après le calcul fonctionnel d'Helffer-Sjöstrand (cf. [HS] ou bien la preuve du lemme 2.2.3), on peut écrire :

$$[\theta(P^{AD}), \tau_2] = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z)[R^{AD}(z), \tau_2]L(dz),$$

où $L(dz)$ désigne la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{C}$ et $\tilde{\theta}$ est une extension presque holomorphe, à support compact, de θ. Comme on a $[R^{AD}(z), \tau_2] = -R^{AD}(z)[P^{AD}, \tau_2]R^{AD}(z)$ avec :

$$[P^{AD}, \tau_2] = \Pi[-h^2\Delta_x, \tau_2]\Pi = \text{“}O(h)\text{”},$$

on obtient (4.3 ;5) comme dans la preuve du lemme 4.3 de [KMW1]. D'autre part, on a, pour tout j :

$$\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_j - \tau_1\Pi_j\theta(P_j) = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial\bar{z}}(z)(\Pi R^{AD}(z)\tau_1\Pi_j - \tau_1\Pi_j R_j(z))L(dz),$$

avec $R_j(z) = (P_j - z)^{-1}$ et :

$$\Pi R^{AD}(z)\tau_1\Pi_j - \tau_1\Pi_j R_j(z) = \Pi R^{AD}(z)(\tau_1\Pi_j P_j - P^{AD}\tau_1\Pi_j)R_j(z).$$

Comme on a :

$$\begin{aligned}
P^{AD}\tau_1\Pi_j - \tau_1\Pi_j P_j &= (P_e(\cdot;h) - P_e(\cdot;0))\tau_1\Pi_j + \Pi[-h^2\Delta_x, \tau_1\Pi_j] \\
&= (P_e(\cdot;h)\Pi_j - P_e(\cdot;0)\Pi_j(0))\tau_1 + P_e(\cdot;0)(\Pi_j - \Pi_j(0))\tau_1 + \text{“}O(h)\text{”} \\
&= \text{“}O(h)\text{”},
\end{aligned}$$

d'après la preuve de la proposition 4.1.3, on obtient de même (4.3 ;6).

On a donc, pour tout j :

$$\begin{aligned}
\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_j i[P, a^w]\Pi_j\tau_1\theta(P^{AD}) &= \theta(P^{AD})\tau_1\Pi_j i[P_j, a^w]\Pi_j\tau_1\theta(P^{AD}) \\
&= \tau_1\Pi_j\theta(P_j)i[P_j, a^w]\theta(P_j)\Pi_j\tau_1 + O(h^2) \\
&\geq ch\tau_1\Pi_j\theta^2(P_j)\Pi_j\tau_1 + O(h^2)
\end{aligned}$$

car a est une fonction fuite globale pour $p_j - E_0$ à l'énergie $E - E_0$. En utilisant de nouveau (4.3 ;6), ce terme est donc minoré par :

$$ch\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_j\tau_1\theta(P^{AD}) + O(h^2).$$

D'après (4.3 ;4) et les propriétés de τ_2, on peut écrire :

$$\theta(P^{AD})\tau_2\Pi i[P, Op_h^w(x\cdot\xi)]\Pi\tau_2\theta(P^{AD}) = h\theta(P^{AD})\tau_2\Pi(-2h^2\Delta_x - x\cdot(\nabla_x I_a))\Pi\tau_2\theta(P^{AD})$$

$$= h\tau_2\theta(P^{AD})(2(P^{AD} - E_0) - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e - E_0))\theta(P^{AD})\tau_2 + O(h^2)$$

$$\geq h\tau_2\theta(P^{AD})(3(E-E_0)/2 - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e - E_0))\theta(P^{AD})\tau_2 + O(h^2)$$
$$\geq h\theta(P^{AD})\tau_2(3(E-E_0)/2 - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e - E_0))\tau_2\theta(P^{AD}) + O(h^2)$$
$$\geq h\frac{E-E_0}{2}\theta(P^{AD})\tau_2\Pi\tau_2\theta(P^{AD}) + O(h^2).$$

En regroupant les deux inégalités, on récupère :

$$\theta(P^{AD})i[P^{AD}, F^{AD}]\theta(P^{AD}) \geq c' h\theta(P^{AD})\left[\sum_{j=1}^{q}\tau_1\Pi_j\tau_1 + \tau_2\Pi\tau_2\right]\theta(P^{AD}) + O(h^2)$$

où le terme entre crochets vaut Π. Pour h assez petit, on a donc donc l'estimation de Mourre (4.2 ;2). $\square$

Ainsi, en appliquant le théorème 4.2.2, on obtient le résultat suivant :

Théorème 4.3.5. *On suppose que les potentiels vérifient (D_ρ) pour un réel $\rho > 0$. Soit $E_0 \in \sigma_{disc}(P^a(0))$ vérifiant l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$ et l'hypothèse de "non-croisement" (NC). Pour toute énergie $E \notin \{0, E_0\}$, non-captive pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_j(x;0)$, pour tout $s > 1/2$, on a :*

$$|| < x >^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i0; h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}), \tag{4.3;7}$$

pour h assez petit, uniformément pour λ assez proche de E.

Remarque 4.3.6. *D'après la remarque 4.3.2, on suppose en fait dans ce théorème 4.3.5 que :*

$$E \notin [\inf_{x,j} \lambda_j(x;0); E_0].$$

Un cas intéressant (cf. partie 5) est $E > E_0$. Si l'on veut appliquer le théorème 4.2.3, il convient d'avoir :

$$E_0 < \inf_h(\inf\sigma(Q^{AD}(h))).$$

Cette inégalité est réalisée si E_0 vérifie celle de la remarque 4.2.5, ce qui impose en particulier :

$$E_0 = \inf\sigma(P^a(0)).$$

Dans ce cas, on peut vérifier que la valeur propre E_0 est simple (cf. [RS4]). On ne récupère donc que le résultat de [KMW1]. On peut cependant améliorer ce résultat (cf. théorème 4.3.7).

Pour terminer ce paragraphe, on va montrer que l'estimation (4.2 ;4) de la résolvante totale est encore valable si les potentiels sont à longue portée. Dans le même esprit qu'au paragraphe 2.2, on va déduire l'estimation de Mourre semi-classique pour P de celle pour obtenue pour P^{AD}, en vue de prouver le :

Théorème 4.3.7. *Sous les hypothèses du théorème 4.3.5 avec $\rho > 0$, on a encore l'estimation (4.2 ;4) pour h assez petit, uniformément pour λ assez proche de E.*

Démonstration : Comme opérateur conjugué pour P, on considère le même opérateur F^{AD} utilisé dans la preuve de la proposition 4.3.4 :

$$F^{AD} = \sum_{j=1}^{q} \tau_1 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_1 + \tau_2 \Pi a^w \Pi \tau_2.$$

Notons que le double commutateur $[[P, F^{AD}], F^{AD}]$ vérifie l'estimation (4.2 ;1). Comme au paragraphe 2.2, on exploite la condition sur l'énergie E dans le :

Lemme 4.3.8. *([KMW1], lemme 4.3) Soient $\theta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$ et $\alpha > 0$ tels que, pour tout h assez petit, on ait :*

$$d(supp\theta, \sigma(Q^{AD}(h))) \geq \alpha.$$

Alors on a :

$$||\theta(P) - \theta(P^{AD})|| = O(h).$$

Démonstration : Il suffit de remarquer que la preuve du lemme 4.3 de [KMW1] est encore valable sous l'hypothèse (D_ρ) avec $\rho > 0$. $\square$

Soit $\eta > 0$ assez petit tel que $0, E_0 \notin]E - \eta; E + \eta[$ et $\theta \in C^\infty(I\!R; I\!R)$ valant 1 près de E et à support dans $]E - \eta; E + \eta[$. D'après le lemme 4.3.8, on a :

$$\theta(P) i[P, F^{AD}] \theta(P) = \theta(P^{AD}) i[P, F^{AD}] \theta(P^{AD}) + O(h^2.)$$

Or, comme $\theta(0) = 0$, on a $\theta(P^{AD}) = \Pi\theta(P^{AD}) = \theta(P^{AD})\Pi$ (cf. la preuve de la proposition 2.1.5). On a donc :

$$\theta(P^{AD}) i[P, F^{AD}] \theta(P^{AD}) = \theta(P^{AD}) i[P^{AD}, F^{AD}] \theta(P^{AD}).$$

Par conséquent, d'après la preuve de la proposition 4.3.4, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \theta(P) i[P, F^{AD}] \theta(P) &\geq ch\theta^2(P^{AD}) + O(h^2) \\ &\geq ch\theta^2(P) + O(h^2) \end{aligned}$$

en réutilisant le lemme 4.3.8. On obtient ainsi l'estimation de Mourre semi-classique pour P. La méthode de Mourre à paramètre donne l'estimation annoncée. $\square$

4.4 Estimation semi-classique de la résolvante de P.

Dans les paragraphes 4.1, 4.2 et 4.3, on s'est contenté de considérer une seule valeur propre de $P^a(0)$. Comme on va le voir, il est possible, comme au paragraphe 2.5, d'en considérer plusieurs, d'adapter les techniques du paragraphe 4.3 à cette nouvelle situation et d'obtenir un contrôle semi-classique de la résolvante de P. En particulier, les résultats sur l'approximation de Born-Oppenheimer des opérateurs d'onde (cf. [KMW1], partie 4) sont encore valables. Cette situation sera reprise pour l'étude semi-classique des sections efficaces totales (cf. partie 5).

Dans le cadre du paragraphe 4.1, on considère cette fois $E_1 < \ldots < E_r \in \sigma_{disc}(P^a(0))$, chaque E_j étant de multiplicité m_j (et $m = \sum m_j$). Pour tout j, on suppose que la valeur propre E_j vérifie l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$. Par conséquent, on peut construire les projecteurs $\Pi_{j0}(h)$ et $\Pi_j(x;h)$ correspondant par une formule de Cauchy (cf. (4.1 ;3) et (4.1 ;5)), qui vérifient les propriétés de ce paragraphe 4.1. L'estimation (4.1 ;7) devient bien sûr :

$$||\Pi_j(x;h)P_e(x;h)\Pi_j(x;h) - E_j\Pi_j(x;h)|| = O(< x >^{-\rho}). \tag{4.4;1}$$

Quant à la proposition 4.1.3, elle s'applique, pour tout j, aux valeurs propres de $P_e(x;0)$, $\lambda_{j1}(x;0), \ldots, \lambda_{jm_j}(x;0)$, qui tendent vers E_j lorsque $|x| \to \infty$.

En posant, pour tout $(x;h)$:

$$\Pi_0(h) = \sum_{j=1}^{r} \Pi_{j0}(h),\ \Pi(x;h) = \sum_{j=1}^{r} \Pi_j(x;h),$$

on définit des projecteurs spectraux de $P_e(x;0)$ et $P^a(h)$ respectivement. Ils vérifient les estimations du lemme 4.1.1 et de la proposition 4.1.2, l'estimation (4.1 ;7) étant remplacée par la suivante :

$$||\Pi(x;h)\left(P_e(x;h) - \sum_{j=1}^{r} E_j\Pi_j(x;h)\right)|| = O(< x >^{-\rho}). \tag{4.4;2}$$

Comme on l'a vu au paragraphe 2.5, on peut définir des opérateurs P^{AD} et Q^{AD} dans ces conditions. Pour chaque j, on suppose que E_j satisfait à l'hypothèse de "non-croisement" (NC). En particulier, il y a $l(j)$ fonctions $\lambda_{jl}(\cdot;0)$ qui tendent vers E_j à l'infini et chaque $\lambda_{jl}(\cdot;0)$ est de multiplicité constante. On peut trouver une famille $\{\Gamma_{jl}(x), x \in I\!R^n\}$ de contours dans $\mathbb{C}$ telle que :

$$\Pi_{jl}(x;h) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_{jl}(x)} (z - P_e(x;h))^{-1}dz$$

soit le projecteur spectral associé à $\lambda_{jl}(x;h)$. Notons que, comme dans la preuve de la proposition 4.3.4, le contrôle des dérivées des $\Pi_{jl}(\cdot;0)$ n'est pas clair. En revanche, on voit que les valeurs propres $\lambda_{jl}(x;0)$ vérifient la condition (D'_ρ) (cf. proposition 4.3.1).

Pour obtenir le théorème d'absorption limite semi-classique, on va montrer la :

Proposition 4.4.1. *On suppose que les potentiels vérifient (D_ρ) pour un réel $\rho > 0$. Soient $E_1 < \ldots < E_r \in \sigma_{disc}(P^a(0))$ vérifiant chacune l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$ et l'hypothèse de "non-croisement" (NC). Pour toute énergie $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\}$, non-captive pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ $(1 \leq j \leq r,\ 1 \leq l \leq l(j))$, il existe un opérateur $F^{AD}(h)$ satisfaisant, pour h assez petit, les deux estimations suivantes :*

$$||\, [[P^{AD}(h), F^{AD}(h)], F^{AD}(h)](P^{AD}(h) + i)^{-1}|| = O(h^2) \tag{4.4;3}$$

et :

$$\chi(P^{AD}(h))i[P^{AD}(h), F^{AD}(h)]\chi(P^{AD}(h)) \geq \alpha h \chi^2(P^{AD}(h)) \tag{4.4;4}$$

avec $\chi = 1\!\!1_{]E-\delta,E+\delta[}$, $\delta > 0$ et $\alpha > 0$ indépendants de h.

Démonstration : Cette fois, l'hypothèse de non-capture impose, pour tout j :

$$E \notin [\inf_{x,l} \lambda_{jl}(x;0); E_j].$$

Soit s le plus grand entier j tel que $E_j < E$. On adopte la stratégie de la preuve de la proposition 4.3.4. On a besoin d'une fonction a qui soit une fonction fuite globale pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0) - E_j$, avec $j \leq s$, à l'énergie $E - E_j > 0$. Comme on a des énergies a priori différentes, on généralise la proposition 4.3.3 sous la forme du :

Lemme 4.4.2. *On considère des potentiels $(V_j)_{1\leq j\leq q}$ de $C^\infty(I\!R^n; I\!R)$, vérifiant (D'_ρ) pour un réel $\rho > 0$. Pour tout j, soit $\lambda_j > 0$ une énergie de non-capture pour l'hamiltonien classique $p_j(x,\xi) = |\xi|^2 + V_j(x)$. Sous l'hypothèse de "non-croisement" suivante :*

$$j \neq k \Longrightarrow (\forall x \in I\!R^n,\ V_j(x) - \lambda_j \neq V_k(x) - \lambda_k) \tag{4.4;5}$$

il existe une fonction qui est, simultanément pour tout j, une fonction fuite globale à l'énergie λ_j pour l'hamiltonien p_j.

Démonstration : D'après la preuve de la proposition 4.3.3, il existe donc $R > 0$, $C_0 > 0$ et $\epsilon > 0$ tels que, pour tout j, on ait :
- $\{p_j, x\cdot\xi\} \geq \lambda_0$ pour $|x| \geq R$ et $(x,\xi) \in p_j^{-1}(]\lambda_j - \epsilon; \lambda_j + \epsilon[)$,
- il existe $a_j \in C^\infty(I\!R^{2n})$ de la forme :

$$a_j(x,\xi) = x\cdot\xi + C_j\chi_j(x)f_j(x,\xi)$$

où $C_j > 0$, $\chi_j \in C_0^\infty(I\!R^n)$, $\chi_j f_j \in C_0^\infty(I\!R^{2n})$, et telle que :

$$\{p_j, a_j\} \geq C_0$$

sur $p_j^{-1}(]\lambda_j - \epsilon; \lambda_j + \epsilon[)$.

Soient $R' \equiv \max_j \sup\{|x|; x \in supp\chi_j\} > R$ et $R'' > R'$. Grâce à l'hypothèse de "non-croisement" (4.4 ;5), on va montrer, comme dans la preuve de la proposition 4.3.3, qu'il existe $\alpha > 0$ tel que, pour tout ϵ assez petit, on ait :

$$(V_j,\lambda_j) \neq (V_k,\lambda_k) \Longrightarrow d(\{|x| \leq R''\} \cap p_j^{-1}(]\lambda_j - \epsilon; \lambda_j + \epsilon[), \{|x| \leq R''\} \cap p_k^{-1}(]\lambda_k - \epsilon; \lambda_k + \epsilon[)) \geq \alpha$$

Si $V_j \neq V_k$, on peut reprendre les arguments de cette preuve de la proposition 4.3.3 en remplaçant V_j par $V_j - \lambda_j$ et V_k par $V_k - \lambda_k$.

Supposons maintenant que $V_j = V_k$ mais $\lambda_j \neq \lambda_k$. En prenant (x,ξ) et (x',ξ') comme dans la preuve en question, on voit que si $|x - x'|$ est petit alors $|\xi|^2 - \lambda_j - (|\xi'|^2 - \lambda_k)$ l'est aussi. Comme $\lambda_j \neq \lambda_k$, ξ et ξ' ne peuvent être arbitrairement proches.

En prenant la partition de l'unité $(t_j)_{1\leq j\leq q}$ utilisée dans la preuve de la proposition 4.3.3, on vérifie de même que la fonction $a = \sum t_j a_j$ convient. □

Poursuivons maintenant la preuve de la proposition 4.4.1. Grâce aux hypothèses de "non-croisement" (NC) et de stabilité semi-classique $(HS(h))$, on a, pour tout j :

$$l \neq l' \Longrightarrow (\forall x \in I\!R^n,\ \lambda_{jl}(x;0) - E_j - (E - E_j) \neq \lambda_{jl'}(x;0) - E_j - (E - E_j))$$

et :

$$j \neq j' \Longrightarrow (\forall x \in I\!R^n,\, \forall l, l',\, \lambda_{jl}(x;0) - E_j - (E - E_j) \neq \lambda_{j'l'}(x;0) - E_{j'} - (E - E_{j'})).$$

On peut donc appliquer le lemme 4.4.2 aux hamiltoniens classiques $p_{jl}(x,\xi) = |\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0) - E_j$ aux énergies $E - E_j$. Soit a la fonction "multi-fuite" globale correspondante. D'après les propriétés des projecteurs Π_j (cf. (4.4 ;1)), on peut choisir le R de la preuve de ce lemme 4.4.2 de sorte que, pour tout j, on ait l'estimation :

$$||\Pi_j(x;h)x\cdot(\nabla_x I_a)(x;h)\Pi_j(x;h)|| + ||2\Pi_j(x;h)(P_e(x;h) - E_j)\Pi_j(x;h)|| \leq E - E_j, \quad (4.4;6)$$

pour $|x| \geq R$. Soient $\tau_1, \tau_2 \in C^\infty(I\!R^n)$ telles que $\tau_1^2 + \tau_2^2 = 1$. On impose que τ_1 vaille 1 sur $\{x; |x| \leq R'\}$ et soit à support dans $\{x; |x| \leq R"\}$. On pose :

$$F^{AD} = \sum_{j=1}^{r} \left(\sum_{l=1}^{l(j)} \tau_1 \Pi_{jl} a^w \Pi_{jl} \tau_1 + \tau_2 \Pi_j a^w \Pi_j \tau_2 \right),$$

où a^w l'opérateur h-pseudo-différentiel de symbole de Weyl a. D'après la régularité des projecteurs Π_{jl} et le choix du support de τ_1 d'une part, et les propriétés des Π_j et celles de a d'autre part, l'opérateur F^{AD} vérifie (4.4 ;3).

Pour obtenir l'estimation de Mourre semi-classique (4.4 ;4), on reprend les arguments de la preuve de la proposition 4.3.4, les $\Pi_j(x;h)$ jouant le rôle de $\Pi(x;h)$ et les $\Pi_{jl}(x;h)$ celui des $\Pi_j(x;h)$. Comme on a aussi :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{r} \Pi_j \left(\sum_{l=1}^{l(j)} (\nabla_x \Pi_{jl}) \Pi_{jl} + \Pi_{jl} (\nabla_x \Pi_{jl}) \right) \Pi_j &= \sum_{j=1}^{r} \sum_{l=1}^{l(j)} \Pi_j (\nabla_x \Pi_{jl}) \Pi_j \\ &= \sum_{j=1}^{r} \Pi_j (\nabla_x \Pi_j) \Pi_j = 0 \end{aligned}$$

et d'après les propriétés de τ_1 et τ_2, on obtient :

$$i[P^{AD}, F^{AD}] = \sum_{j=1}^{r} \left(\sum_{l=1}^{l(j)} \tau_1 \Pi_{jl} i[P_{jl}, a^w] \Pi_{jl} \tau_1 + \tau_2 \Pi_j i[P, Op_h^w(x\cdot\xi)] \Pi_j \tau_2 \right) + \text{“}O(h^2)\text{”}$$

en posant $P_{jl} = -h^2\Delta_x + \lambda_{jl}(x;0)$.

Soit $\eta > 0$ assez petit tel que $0, E_j \notin]E-\eta; E+\eta[$, pour tout j, et $\theta \in C^\infty(I\!R; I\!R)$ valant 1 près de E et à support dans $]E-\eta; E+\eta[$. Grâce au calcul fonctionnel d'Helffer-Sjöstand (cf. [HS]), on a, pour tout j :

$$\theta(P^{AD})\tau_2\Pi_j - \tau_2\Pi_j\theta(P_j^{AD}) = O(h)$$

car on a :

$$P^{AD}\tau_2\Pi_j - \tau_2\Pi_j P_j^{AD} = \Pi[-h^2\Delta_x, \tau_2\Pi_j]\Pi_j,$$

et pour tout j et tout l :

$$\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_{jl} - \tau_1\Pi_{jl}\theta(P_{jl}) = O(h).$$

Comme dans la preuve de la proposition 4.3.4, on obtient donc :

$$\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_{jl}i[P_{jl},a^w]\Pi_{jl}\tau_1\theta(P^{AD}) \geq ch\theta(P^{AD})\tau_1\Pi_{jl}\tau_1\theta(P^{AD}) + O(h^2)$$

pour tout j et tout l. D'autre part, on a, pour tout j :

$$\begin{aligned}
\theta(P^{AD})\tau_2\Pi_j i[P, Op_h^w(x\cdot\xi)]\Pi_j\tau_2\theta(P^{AD}) &= h\theta(P^{AD})\tau_2\Pi_j(-2h^2\Delta_x - x\cdot(\nabla_x I_a))\Pi_j\tau_2\theta(P^{AD})\\
&= h\tau_2\theta(P_j^{AD})\Pi_j(2(P_j^{AD}-E_j) - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e-E_j))\Pi_j\theta(P_j^{AD})\tau_2 + O(h^2)\\
&\geq h\tau_2\Pi_j\theta(P_j^{AD})(3(E-E_j)/2 - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e-E_j))\theta(P_j^{AD})\Pi_j\tau_2 + O(h^2)\\
&\geq h\theta(P^{AD})\tau_2\Pi_j(3(E-E_j)/2 - x\cdot(\nabla_x I_a) - 2(P_e-E_j))\Pi_j\tau_2\theta(P^{AD}) + O(h^2)\\
&\geq h\frac{E-E_j}{2}\theta(P^{AD})\tau_2\Pi_j\tau_2\theta(P^{AD}) + O(h^2)
\end{aligned}$$

d'après (4.4 ;6). En regroupant les inégalités, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\theta(P^{AD})i[P^{AD},F]\theta(P^{AD}) &\geq c^{'}h\theta(P^{AD})\left[\sum_{j=1}^{r}\left(\sum_{l=1}^{l(j)}\tau_1\Pi_{jl}\tau_1 + \tau_2\Pi_j\tau_2\right)\right]\theta(P^{AD}) + O(h^2)\\
&\geq c^{'}h\theta(P^{AD})^2 + O(h^2)
\end{aligned}$$

ce qui termine la preuve de cette proposition 4.4.1. □

En appliquant successivement les théorèmes 4.2.2 et 4.2.3, on obtient donc le :

Théorème 4.4.3. *On suppose que les potentiels vérifient* (D_ρ) *pour un réel* $\rho > 0$. *Soient* $E_1 < \ldots < E_r \in \sigma_{disc}(P^a(0))$ *vérifiant chacune l'hypothèse de stabilité semi-classique* $(HS(h))$ *et l'hypothèse de "non-croisement"* (NC). *Pour toute énergie* $E \notin \{0\}\cup\{E_j, 1 \leq j \leq r\}$, *non-captive pour chaque hamiltonien classique* $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ $(1 \leq j \leq r,\ 1 \leq l \leq l(j))$, *pour tout* $s > 1/2$, *on a :*

$$|| < x >^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i0;h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}), \qquad (4.4;7)$$

pour h *assez petit, uniformément pour* λ *assez proche de* E. *Si, de plus, les potentiels sont à courte portée* $(\rho > 1)$ *et si* E *vérifie :*

$$E < \inf_h(\inf\sigma(Q^{AD}(h))),$$

alors, pour $s > 1/2$, *les deux estimations suivantes sont valables :*

$$|| < x >^{-s} R(\lambda \pm i0;h) < x >^{-s} || = O(h^{-1}) \qquad (4.4;8)$$

et :

$$|| < x >^{-s} [R(\lambda \pm i0;h) - \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)] < x >^{-s} || = O(1), \qquad (4.4;9)$$

pour h *assez petit, uniformément pour* λ *assez proche de* E.

Remarque 4.4.4. *D'après la remarque 4.3.2, on suppose en fait dans ce théorème 4.3.5 que, pour tout j :*

$$E \notin [\inf_{x,l} \lambda_{jl}(x;0); E_j].$$

Il est intéressant d'avoir $E > E_r$ (cf. le corollaire 4.4.5 et la partie 5). Dans ce cas, pour obtenir (4.4 ;8) et (4.4 ;9), il convient d'avoir :

$$E_r < \inf_h(\inf \sigma(Q^{AD}(h))).$$

Cette inégalité est réalisée si E_r vérifie celle de la remarque 4.2.5, ce qui impose en particulier :

$$E_1 = \inf \sigma(P^a(0)).$$

A la différence de la remarque 4.3.6, les valeurs propres E_j sont a priori multiples (sauf E_1).

Grâce au théorème 4.1 de [KMW1], ce théorème 4.4.3 permet, pour des potentiels à courte portée, d'estimer semi-classiquement les opérateurs d'onde $\Omega_\pm^{NAD}$ et fournit une approximation semi-classique, dans une certaine bande d'énergie, des opérateurs d'onde de canal $\Omega_\pm$ (cf. paragraphe 2.3). Avec les notations du paragraphe 2.3, on a le :

Corollaire 4.4.5. *Sous les hypothèses du théorème 4.4.3 avec $\rho > 1$ et $E_r < \inf_h(\inf \sigma(Q^{AD}(h)))$, soit I un intervalle non-captif pour les hamiltoniens classiques $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$, tel que :*

$$I \subset]E_r; \inf_h(\inf \sigma(Q^{AD}(h)))[$$

ou bien tel que, pour un certain $j \leq r$:

$$I \subset]E_{j-1}; \inf_{x,l} \lambda_{jl}(x;0)[$$

(avec la convention "$E_0 = -\infty$"). Alors, pour toute fonction $\chi \in C_0^\infty(I; I\!R)$, il existe une constante $C_\chi > 0$ telle que :

$$||(\Omega_\pm^{NAD}(h) - 1)\chi(P^{AD}(h))|| \leq C_\chi h$$

et :

$$||(\Omega_\pm(h) - \Omega_\pm^{AD}(h))\chi(P_a(h))|| \leq C_\chi h.$$

Remarque 4.4.6. *Ce corollaire généralise, pour des potentiels réguliers, le résultat de [KMW1] où l'on considérait une seule valeur propre simple de $P^a(0)$. Signalons que, dans [KMW2], le résultat de [KMW1] est obtenu pour des potentiels présentant des singularités coulombiennes.*

Démonstration : La première estimation découle du fait que l'on peut appliquer le théorème 4.1 de [KMW1] puisque l'on dispose de l'estimation semi-classique de la résolvante adiabatique du théorème 4.4.3. Pour obtenir la seconde, rappelons que l'on a :

$$\Omega_\pm = \Omega_\pm^{NAD} \Omega_\pm^{AD}$$

(cf. paragraphe 2.3 et 2.5). Comme dans [KMW1], on peut remarquer que, si ϕ est une fonction de $C_0^\infty(I;\mathbb{R})$ vérifiant $\phi\chi = \chi$, alors on a :

$$(\Omega_\pm(h) - \Omega_\pm^{AD}(h))\chi(P_a(h)) = (\Omega_\pm^{NAD}(h) - 1)\phi(P^{AD}(h))\Omega_\pm^{AD}(h)\chi(P_a(h)),$$

grâce à la propriété d'intervertion des opérateurs d'onde. La seconde estimation provient alors de la première. $\square$

Au sujet de cette approximation semi-classique des opérateurs d'onde de canal, on peut être plus précis. Considérons, pour $1 \leq j \leq r$, les opérateurs d'onde :

$$\Omega_{j,\pm}^{AD} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP_j^{AD}} e^{-itP_a} \Pi_{j0}.$$

D'après les paragraphes 2.3 et 2.5, ces opérateurs $\Omega_{j,\pm}^{AD}$ existent et sont complets. Remarquons qu'en général, on a :

$$\Omega_\pm^{AD} \neq \sum_{j=1}^{r} \Omega_{j,\pm}^{AD}.$$

Certes les opérateurs P_j^{AD} commutent deux à deux mais il se trouve qu'en général, on a :

$$P^{AD} \neq \sum_{j=1}^{r} P_j^{AD}.$$

En fait, l'évolution $e^{itP^{AD}}$ "mélange les niveaux". Cependant, on dispose de la proposition 4.4.7 suivante, qui précise le corollaire 4.4.5 :

Proposition 4.4.7. *Soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R};\mathbb{R})$ dont le support est un intervalle tel que $0, E_j \notin supp\chi$, pour tout j. Posons :*

$$r_\chi = \max\{1 \leq j \leq r;\ E_j < \inf(supp\chi)\}$$

(avec la convention $r_\chi = 0$ si $E_1 > \sup(supp\chi)$). Si le support de χ est non-captif pour les hamiltioniens classiques $|\xi|^2 + \lambda_j(x;0)$, pour $1 \leq j \leq r_\chi$, alors on a :

$$\left|\left| \left(\Omega_\pm^{AD}(h) - \sum_{j=1}^{r_\chi} \Omega_{j,\pm}^{AD}(h)\right) \chi(P_a(h))\right|\right| = O(h).$$

Démonstration : Signalons tout d'abord que, pour $j > r_\chi$, alors on a :

$$\Pi_{j0}(h)\chi(P_a(h)) = \Pi_{j0}(h)\chi(-h^2\Delta_x + P^a(h)) = 0$$

car pour h assez petit, les valeurs propres de $P^a(h)$ qui tendent vers E_j sont au-dessus du support de χ. On a donc : $\Omega_{j,\pm}^{AD}(h)\chi(P_a(h)) = 0$. Pour obtenir le résultat, il suffit d'avoir, pour $1 \leq j \leq r_\chi$:

$$||(\Omega_\pm^{AD}(h) - \Omega_{j,\pm}^{AD}(h))\chi(P_a(h))|| = O(h). \quad (4.4;10)$$

On introduit les opérateurs d'onde suivants :

$$\Omega_{j,\pm}^{NAD} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP^{AD}} e^{-itP_j^{AD}} E_{ac}(P_j^{AD}).$$

On rappelle que l'on a : $\Pi_j E_{ac}(P_j^{AD}) = E_{ac}(P_j^{AD})$. Comme on a :

$$\begin{aligned}(P^{AD} - P_j^{AD})\Pi_j &= \Pi(-h^2\Delta_x)\Pi_j - \Pi_j(-h^2\Delta_x)\Pi_j \\ &= -\sum_{k\neq j}\Pi[-h^2\Delta_x, \Pi_k]\Pi_j \\ &= O(h < x >^{-\rho-1}) \cdot h\nabla_x\Pi_j + O(h^2 < x >^{-\rho-2})\Pi_j\end{aligned}$$

on voit, par la méthode de Cook, que ces opérateurs d'onde existent (cf. la proposition 2.3.4). Grâce à la propriétés d'intervertion de ces opérateurs d'onde, les estimations (4.4 ;10) découlent des suivantes :

$$||(\Omega_{j,\pm}^{NAD}(h) - 1)\chi(P_j^{AD}(h))|| = O(h), \tag{4.4; 11}$$

pour $1 \leq j \leq r_\chi$.

Pour obtenir (4.4 ;11), vérifions que l'on peut reprendre la preuve du théorème 4.1 de [KMW1]. Tout d'abord, pour $1 \leq j \leq r_\chi$, on a l'estimation semi-classique de la résolvante de P_j^{AD} sur le support de χ (cf. théorème 4.3.5) grâce aux hypothèses de non-capture et de "non-croisement". On a donc, pour tout $s > 1/2$, l'existence d'une constante $C > 0$ telle que l'on ait :

$$\int_{-\infty}^{\infty} || < x >^{-s} e^{-ih^{-1}tP_j^{AD}(h)}\chi(P_j^{AD}(h))f||^2 dt \leq C||f||^2,$$

pour toute fonction $f \in L^2(I\!R_{x,y}^{n(N+1)})$, uniformément pour h assez petit (cf. le lemme 4.2 de [KMW1]). En écrivant :

$$P^{AD} = P_j^{AD} + Q_j^{AD} + V_j$$

(avec $Q_j^{AD} = \hat{\Pi}_j P \hat{\Pi}_j$, $\hat{\Pi}_j = \Pi - \Pi_j$), on peut reprendre la preuve du lemme 4.3 de [KMW1] et obtenir :

$$||(\chi(P^{AD}(h)) - \chi(P_j^{AD}(h))) < x >^{\rho} || = O(h),$$

pour tout $1 \leq j \leq r_\chi$. Enfin, comme on a :

$$\begin{aligned}V_j\Pi_j &= \sum_{k\neq j}(\Pi_k P\Pi_j + \Pi_j P\Pi_k)\Pi_j \\ &= \sum_{k\neq j}\Pi_k(-h^2\Delta_x)\Pi_j \\ &= -\sum_{k\neq j}[-h^2\Delta_x, \Pi_k]\Pi_j \\ &= O(h < x >^{-\rho-1}) \cdot h\nabla_x\Pi_j + O(h^2 < x >^{-\rho-2})\Pi_j,\end{aligned}$$

on peut reprendre les arguments de la preuve de ce théorème 4.1 de [KMW1] et obtenir (4.4 ;11). □

Pour terminer ce paragraphe, signalons que le théorème 4.3.7 est encore valable dans les conditions présentes :

Théorème 4.4.8. *Sous les hypothèses du théorème 4.4.3 avec $\rho > 0$, on a encore l'estimation (4.4 ;8), pour h assez petit, uniformément pour λ assez proche de E.*

Démonstration : En reprenant l'opérateur F^{AD} de la preuve de la proposition 4.4.1 comme opérateur conjugué, la preuve est identique à celle du théorème 4.3.7. □

4.5 Autres utilisations d'une fonction fuite ou "multi-fuite" globale.

La construction d'une fonction fuite ou "multi-fuite" globale permet, dans d'autres situations, d'obtenir des théorèmes d'absorption limite semi-classiques. On va établir de tels théorèmes pour un opérateur de Schrödinger matriciel et pour l'opérateur de Dirac avec champ électrique scalaire. On comparera le théorème pour cet opérateur de Dirac avec le résultat obtenu dans [Ce].

Commençons par un cas très similaire à celui traité au paragraphe 4.4. Prenons un opérateur de Schrödinger matriciel de la forme :

$$H = -h^2\Delta_x I_m + M(x),$$

agissant dans $(L^2(I\!R^n))^m$, où I_m est la matrice identité à m lignes et m colonnes (avec $m > 1$) et $M(x)$ est une matrice symétrique réelle de même taille, vérifiant les propriétés suivantes :
– $I\!R^n \ni x \mapsto M(x)$ est de classe C^∞,
– il existe une matrice symétrique réelle M_0 et un réel $\rho > 0$ tels que l'on ait :

$$\forall\alpha \in I\!N^n,\ \exists C_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||\partial_x^\alpha(M(x) - M_0)|| \leq C_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}\ . \qquad (4.5;1)$$

Soient $E_1 < \ldots < E_r$ les valeurs propres de M_0, chaque E_j étant de multiplicité m_j (on a donc $m = \sum m_j$). D'après la propriété (4.5 ;1) pour $\alpha = 0$, il existe, pour tout j, m_j fonctions $I\!R^n \ni x \mapsto \lambda_{jl}(x) \in \sigma(M(x))$ qui tendent vers E_j à l'infini. On fait l'**hypothèse de "non-croisement"** (NC') suivante :

$$(j, l) \neq (j', l') \Longrightarrow (\forall x \in I\!R^n,\ \lambda_{jl}(x) \neq \lambda_{j'l'}(x)).$$

En particulier, pour tout j, il y a $l(j)$ fonctions λ_{jl} qui tendent vers E_j à l'infini et chaque λ_{jl} est de multiplicité constante.

Sous cette hypothèse (NC'), on peut trouver, pour tout j, une famille $\{\Gamma_j(x), x \in I\!R^n\}$ de contours dans $\mathbb{C}$ telle que :

$$\Pi_j(x) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_j(x)}(z - M(x))^{-1}dz$$

soit le projecteur spectral associée à $\{\lambda_{jl}(x), 1 \leq l \leq l(j)\}$ et, pour tout $1 \leq l \leq l(j)$, une famille $\{\Gamma_{jl}(x), x \in I\!R^n\}$ de contours dans $\mathbb{C}$ telle que :

$$\Pi_{jl}(x) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_{jl}(x)}(z - M(x))^{-1}dz$$

soit le projecteur spectral associée à $\lambda_{jl}(x)$. Notons que, pour $|x|$ assez grand, on peut imposer $\Gamma_j(x) = \Gamma_j$, un contour entourant E_j mais aucune des E_k pour $k \neq j$. Le projecteur spectral de M_0 associé à la valeur propre E_j est donné par :

$$\Pi_{j0} = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma_j}(z - M_0)^{-1}dz.$$

Grâce à la propriété (4.5 ;1) et à l'hypothèse de "non-croisement" (NC'), on voit que les projecteurs Π_j et Π_{jl} sont de classe C^∞. De plus, pour tout $\alpha \in I\!N^n$, il existe $D_\alpha > 0$, tel que, pour tout j, on ait :

$$\forall x \in I\!R^n,\ ||\partial_x^\alpha(\Pi_j(x) - \Pi_{j0})|| \le D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}\ . \qquad (4.5;2)$$

Notons que, comme dans la preuve de la proposition 4.3.4, le contrôle des dérivées des Π_{jl} n'est pas clair. En revanche, on voit que les valeurs propres $\lambda_{jl}(x)$ vérifient la condition (D'_ρ) (cf. proposition 4.3.1).

Pour obtenir le théorème d'absorption limite semi-classique, on va montrer la :

Proposition 4.5.1. *Si la fonction $I\!R^n \ni x \mapsto M(x)$ vérifie les propriétés précédentes et l'hypothèse de "non-croisement" (NC') alors, pour toute énergie $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \le j \le r\}$ de non-capture pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x)$ $(1 \le j \le r$ et $1 \le l \le l(j))$, il existe un opérateur F satisfaisant, pour h assez petit, les deux estimations suivantes :*

$$||\,[[H, F], F](H + i)^{-1}|| = O(h^2) \qquad (4.5;3)$$

et :

$$\chi(H)i[H, F^{AD}(h)]\chi(H) \ge \alpha h \chi^2(H) \qquad (4.5;4)$$

avec $\chi = 1\!\!1_{]E-\delta,E+\delta[}$, $\delta > 0$ et $\alpha > 0$ indépendants de h.

Démonstration : La preuve est analogue à celle de la preuve de la proposition 4.4.1 en prenant comme opérateur conjugué :

$$F = \sum_{j=1}^{r} \left(\sum_{l=1}^{l(j)} \tau_1 \Pi_{jl}(a^w I_m)\Pi_{jl}\tau_1 + \tau_2 \Pi_j(a^w I_m)\Pi_j \tau_2 \right),$$

où a est une fonction "multi-fuite" globale, construite avec le lemme 4.4.2, pour les hamiltoniens classiques $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x)$, j vérifiant $E_j < E$, à l'énergie $E - E_j$. $\square$

On obtient donc le :

Théorème 4.5.2. *Pour tout $s > 1/2$, on a :*

$$|| < x >^{-s} (\lambda \pm i0 - H)^{-1} < x >^{-s} || = O(h^{-1}),$$

pour h assez petit, uniformément près de tout point E satisfaisant les hypothèses de la proposition 4.5.1.

Plaçons-nous maintenant dans une situation vraiment différente. Par définition, l'opérateur de Dirac semi-classique, avec champ électrique scalaire, dans la représentation de Weyl, est l'opérateur matriciel du premier ordre :

$$\mathcal{D} = \sum_{j=1}^{3} h\alpha_j D_j + \alpha_4 + V I_4$$

agissant dans $L^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^4)$, où $D_j = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$ et V est le potentiel électrique, que l'on supposera régulier et à longue portée. Les α_j sont des matrices 4-4 suivantes :

$$\alpha_4 = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix},\ \alpha_j = \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix},\ 1 \leq j \leq 3,$$

où I_2 est la matrice identité 2-2 et les σ_j sont les matrices de Pauli suivantes :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(cf. [T], [W7]). Le h-symbole de l'opérateur libre (c'est-à-dire pour $V = 0$) :

$$\sum_{j=1}^{3} \alpha_j \xi_j + \alpha_4$$

qui, pour tout (x,ξ), est une matrice 4-4, admet deux valeurs propres doubles : $\pm < \xi >$ ($< \xi >= \sqrt{1+|\xi|^2}$). Notons par $\Pi_\pm(\xi)$ le projecteur spectral associé. Ces projecteurs, que l'on peut expliciter à l'aide de l'opérateur de Foldy-Wouthuysen (cf. [T], [W7]), sont réguliers en ξ. Le h-symbole de l'opérateur $\mathcal{D}$,

$$d(x,\xi) = \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \xi_j + \alpha_4 + V(x) I_4,$$

admet donc lui aussi deux valeurs propres doubles : $p_\pm(x,\xi) = \pm < \xi > + V(x)$. Essayons d'appliquer la méthode précédente à cet opérateur $\mathcal{D}$. Il convient donc de fabriquer une fonction fuite globale pour p_+ et une pour p_-. Mais, sous les hypothèses faites sur V, il n'existe pas de telles fonctions ! En effet, pour $\lambda_0 \in \mathbb{R}$, les surfaces d'énergie $p_+^{-1}(\lambda_0)$ et $p_-^{-1}(\lambda_0)$ ne sont jamais simultanément non-compactes.

Cependant, il est possible d'obtenir une théorème d'absorption limite semi-classique dans le cas où l'une de ces surfaces est vide. On retrouve ainsi le résultat de [Ce]. Plus précisément, on va montrer le théorème 4.5.3 suivant, où l'hypothèse sur V est moins restrictive que dans [Ce] :

Théorème 4.5.3. *On suppose que le potentiel électrique V est réel et vérifie la condition (D_ρ) pour un $\rho > 0$. Pour toute énergie $\lambda_0 > 1$ vérifiant :*

$$\lambda_0 > \left(\sup_{x\in\mathbb{R}^3} V(x)\right) - 1,$$

de non-capture pour l'hamiltonien classique $p_+(x,\xi) =< \xi > + V(x)$, et pour tout $s > 1/2$, on a :

$$|| < x >^{-s} ((\lambda \pm i0) I_4 - D)^{-1} < x >^{-s} || = O(h^{-1})$$

pour h assez petit, uniformément pour λ assez proche de λ_0.

Remarque 4.5.4. *On a le même résultat si* $\lambda_0 < -1$ *est non-captive pour* p_- *et vérifie :*

$$\lambda_0 < \left(\inf_{x \in I\!R^3} V(x)\right) + 1.$$

Démonstration : D'après la minoration imposée à λ_0, on a, pour $\epsilon > 0$ assez petit :

$$]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[\cap \sigma(P_-) = \emptyset \tag{4.5;5}$$

où $P_- = Op_h^w(p_-)$. Cet opérateur P_- disparaîtra dans l'estimation de Mourre. Il suffit donc de construire une fonction fuite globale pour p_+. C'est l'objet du :

Lemme 4.5.5. *On suppose que le potentiel* V *vérifie la condition* (D'_ρ) *pour* $\rho > 0$. *Pour tout énergie* $\lambda_0 > 1$, *de non-capture pour* p_+, *il existe une fonction* $a \in C^\infty(I\!R^6)$, $\epsilon > 0$ *et* $C_0 > 0$ *tels que :*

$$\{p_+, a\} \geq C_0$$

sur $p_+^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$.

Démonstration : On s'inspire encore de [GM]. Sur $p_+^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$, on a :

$$\begin{aligned}
\{p_+, x \cdot \xi\}(x, \xi) &= \frac{|\xi|^2}{< \xi >} - x \cdot \nabla V(x) \\
&= < \xi > + V(x) - \frac{1}{< \xi >} - x \cdot \nabla V(x) - V(x) \\
&= \lambda_0 - \frac{1}{< \xi >} - x \cdot \nabla V(x) - V(x).
\end{aligned}$$

D'après la décroissance de V et ∇V à l'infini, on peut trouver un réel $R > 0$ tel que, pour $\epsilon > 0$ assez petit, on ait :

$$(x, \xi) \in p_+^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[) \cap \{(x, \xi);\, |x| \geq R\} \Longrightarrow \{p_+, x \cdot \xi\}(x, \xi) \geq \frac{\lambda_0 - 1}{2} \tag{4.5;6}$$

Soit $g \in C_0^\infty(\{x; |x| \leq R_1\}; I\!R)$ avec $R < R_1$, valant 1 pour $|x| \leq R$ et vérifiant $0 \leq g \leq 1$. On pose :

$$f_+(x, \xi) = -\int_0^{+\infty} g \circ \phi_{1,+}^t(x, \xi) dt,$$

où $\phi_{1,+}^t(x, \xi)$ est la composante spatiale du flot $\phi_+^t(x, \xi)$ associé à p_+. D'après l'hypothèse de non-capture, cette fonction f_+ est de classe C^∞ sur $p_+^{-1}(]\lambda_0 - \epsilon; \lambda_0 + \epsilon[)$ et on a, sur cet ensemble :

$$\{p_+, f_+\}(x, \xi) = g(x).$$

De plus, elle est uniformément bornée par $T_{R_1,+}$, le temps de séjour dans la boule $\{x; |x| \leq R_1\}$ pour la dynamique associée à p_+. Soient $\chi_+ \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ valant 1 sur le support de g et $C_+ > 0$, on pose :

$$a(x, \xi) = x \cdot \xi + C_+ \chi_+(x) f_+(x, \xi).$$

La fonction a est C^∞ sur $p_+^{-1}(]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[)$ et on a :

$$\{p_+,a\} = C_+g + C_+f_+\{p_+,\chi_+\} + \{p_+, x\cdot\xi\}$$

Pour C_+ assez grand, on a :

$$C_+g + \{p_+, x\cdot\xi\} \geq \frac{\lambda_0-1}{2}$$

sur $p_+^{-1}(]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[)$, grâce à (4.5 ;6). En choisissant maintenant les variations de χ_+ assez petites (ce qui est possible en agmentant la taille de son support), on assure que :

$$|C_+f_+\{p_+,\chi_+\}| \leq \frac{\lambda_0-1}{4}$$

sur $p_+^{-1}(]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[)$. $\square$

Reprenons la preuve du théorème 4.5.3. Posons :

$$F = \Pi_+ a^w \Pi_+.$$

Cet opérateur vérifie l'estimation suivante :

$$||\,[[\mathcal{D},F],F](\mathcal{D}+i)^{-1}|| = O(h^2).$$

On se propose d'obtenir l'estimation de Mourre semi-classique près de λ_0 avec cet opérateur F. Soit $\theta \in C^\infty(I\!\!R;I\!\!R)$ valant 1 près de λ_0 et à support dans $]\lambda_0-\epsilon;\lambda_0+\epsilon[$ (avec le ϵ du lemme 4.5.5). En posant $P_+ = Op_h^w(p_+)$, on a :

$$\theta(\mathcal{D}) = \theta(P_+)\Pi_+ + \theta(P_-)\Pi_- = \theta(P_+)\Pi_+. \tag{4.5;7}$$

d'après (4.5 ;5). Par conséquent, on peut écrire :

$$\begin{aligned}\theta(\mathcal{D})i[\mathcal{D},F]\theta(\mathcal{D}) &= \theta(P_+)\Pi_+ i[\mathcal{D},F]\Pi_+\theta(P_+)\\ &= \theta(P_+)\Pi_+ i[P_+,\Pi_+a^w\Pi_+]\Pi_+\theta(\mathcal{D}).\end{aligned}$$

Les opérateurs Π_+ et P_+ ne commutent pas forcément mais on a :

$$\begin{aligned}\Pi_+ i[P_+,\Pi_+a^w\Pi_+]\Pi_+ &= \Pi_+ i[VI_4,\Pi_+]a^w\Pi_+\\ &+ \Pi_+a^w i[VI_4,\Pi_+]\Pi_+\\ &+ \Pi_+ i[P_+,a^w]\Pi_+.\end{aligned}$$

Le h-symbole principal de Weyl des deux premiers termes est :

$$h\Pi_+(\xi)\{V,\Pi_+\}(x,\xi)a(x,\xi)\Pi_+(\xi)$$

soit :

$$-ha(x,\xi)(\nabla V)(x)\cdot\Pi_+(\xi)(\nabla_\xi\Pi_+)(\xi)\Pi_+(\xi) = 0$$

d'après la remarque 1.2.6. On en déduit que :

$$\begin{aligned}\theta(\mathcal{D})i[\mathcal{D},F]\theta(\mathcal{D}) &= \theta(P_+)\Pi_+ i[P_+,a^w]\Pi_+\theta(P_+) + O(h^2)\\ &\geq ch\theta(P_+)^2\Pi_+ + O(h^2)\\ &\geq ch\theta(\mathcal{D})^2 + O(h^2)\end{aligned}$$

d'après (4.5 ;7). De nouveau, on termine la preuve par la méthode de Mourre à paramètre. $\square$

5 Approximation de Born-Oppenheimer des sections efficaces totales.

Dans cette partie, on étudie l'asymptotique semi-classique des sections efficaces totales introduites dans la partie 3 sous les hypothèses du paragraphe 4.4. Tout d'abord, on va majorer la section efficace totale σ_α et l'approximer par la section adiabatique σ_α^{AD}. Ensuite on approxime certaines sections efficaces totales $\sigma_{\beta\alpha}$ par les sections efficaces totales adiabatiques correspondantes. De ces approximations, on dégage une estimation des autres sections efficaces totales. Enfin, on montre que la diffusion élastique contribue le plus à la diffusion issue du canal α et on détermine un terme dominant pour σ_α.

5.1 Approximation de Born-Oppenheimer de σ_α et de certaines sections $\sigma_{\beta\alpha}$.

En reprenant les techniques développées dans [RW], on approxime la section efficace totale σ_α par la section "adiabatique" σ_α^{AD} définie au paragraphe 3.2 et on détermine une majoration des deux sections. On va s'appuyer sur les théorèmes optiques du paragraphe 3.3 et le théorème 4.4.3. En utilisant des techniques analogues à celles de [I2], on approxime aussi certaines sections $\sigma_{\beta\alpha}$ par leur équivalent "adiabatique". Ces deux résultats fournissent des renseignements sur les autres sections efficaces totales (en fin du paragraphe). Dans ce paragraphe, on précise tout d'abord les hypothèses, qui seront différentes de celles faites dans les paragraphes 3.3 et 3.4. On explique ensuite pourquoi les résultats de ces paragraphes 3.3 et 3.4 persistent sous les nouvelles hypothèses et enfin on énonce les résultats d'approximation qui seront démontrés aux paragraphes 5.2 et 5.3.

On suppose donc que les potentiels vérifient l'hypothèse (D_ρ) pour $\rho > \frac{n+1}{2}$. Soient $E_1 < \ldots < E_r \in \sigma_{disc}(P^a(0))$, chaque E_j étant de multiplicité m_j (cf. paragraphe 4.4). Pour tout j, on suppose que la valeur propre E_j vérifie l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$ et la condition (NC) de "non-croisement". On suppose de plus que l'on a :

$$E_r < \inf_h (\inf \sigma(Q^{AD}(h))). \tag{G}$$

Soit $E_\alpha(h)$ l'une des valeurs propres de $P^a(h)$ qui converge vers E_{j_α} $(1 \le j_\alpha \le r)$ quand $h \to 0$ (cf. paragraphes 4.1 et 4.4). Dans ce cas, $E_\alpha(h)$ ne vérifie pas l'hypothèse de stabilité du paragraphe 1.2, sauf si, pour tout h petit, elle est de multiplicité m_{j_α} comme E_{j_α} (cf. paragraphe 4.4). Comme au paragraphe 3.4, les canaux "adiabatiques" (les canaux β pour lequels on a défini $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$ au paragraphe 3.2) seront associés à une énergie qui tend vers l'une des E_j quand $h \to 0$ et qui peut être différente de E_{j_α}.

On utilise les notations du paragraphe 3.3 en suivant la dépendance en h. Le canal d'entrée est toujours :

$$\alpha = (a, E_\alpha(h), \tilde{\phi}_\alpha(h)) \tag{A}$$

dont l'énergie $E_\alpha(h)$ qui converge vers E_{j_α} pour un certain j_α compris entre 1 et r. Considérons un intervalle compact I qui vérifie la **propriété de non-capture** (NCG)

suivante : l'intervalle I est non-captif pour les hamiltoniens classiques $p_{jl}(x,\xi) = |\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ (cf. paragraphes 4.3 et 4.4), c'est-à-dire que toute énergie $E \in I$ l'est. De plus, il existe un h_0 assez petit, tel que l'on ait :

$$\sup I < \inf_{h \leq h_0} (\inf \sigma(Q^{AD}(h))),$$

afin de pouvoir appliquer le théorème 4.4.3. Vérifions maintenant que les théorèmes optiques 3.3.1 et 3.3.3 sont encore valables, pour toute énergie $\lambda \in I$.

Pour obtenir ces deux théorèmes, on a essentiellement utilisé l'existence de la valeur au bord des résolvantes $\tilde{R}$ et R^{AD} et les propriétés de décroissance rassemblées dans la proposition 1.2.4 (valable sous les hypothèses du paragraphe 2.5). A l'aide de la proposition 4.1.2 (valable sous les hypothèses du paragraphe 4.4) et du théorème 4.4.3, on peut reprendre à l'identique les preuves de ces deux théorèmes sous les nouvelles hypothèses et obtenir l'existence des sections efficaces totales $\sigma_\alpha(\lambda,\omega_a)$ et $\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega)$ pour $\lambda \in I$, $\omega_a \in \mathbb{S}_a$ et $\omega \in S^{n-1}$. En particulier, la condition $\lambda \notin \sigma_p(P)$ est automatiquement réalisée pour h assez petit (cf. remarque 4.2.1).

En ce qui concerne les théorèmes 3.4.1 et 3.4.5, on se trouve dans la même situation. Ils sont donc aussi valables sous les hypothèses du présent paragraphe, pour $\lambda \in I$. Cependant, on va les reprendre pour obtenir une nouvelle expression des sections efficaces totales en question. Pour mener à bien l'estimation semi-classique des sections $\sigma_{\beta\alpha}$ considérées dans ce théorème 3.4.1, on modifie les expressions obtenues en introduisant des troncatures. Précisons cela. Sous les conditions du théorème 3.4.1, on considère, pour $c = a, b$ et $\gamma = \alpha, \beta$, une fonction $\tilde{\chi}_c \in C^\infty(X_c; I\!R)$ telle que $0 \leq \tilde{\chi}_c \leq 1$, $\tilde{\chi}_c = 0$ près de 0 et $1 - \tilde{\chi}_c \in C_0^\infty(X_c; I\!R)$. On pose :

$$\tilde{L}_c = P\tilde{\chi}_c - \tilde{\chi}_c P_c.$$

De même, sous les conditions du théorème 3.4.5, on prend une fonction $\chi \in C^\infty(I\!R^n; I\!R)$, valant 0 près de 0, telle que $1 - \chi \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ et on pose :

$$L^{AD} = P^{AD}\chi - \chi P_a.$$

On montre alors la proposition :

Proposition 5.1.1. *Sous les hypothèses précédentes, on considère un canal $\beta = (b, E_\beta(h), \tilde{\phi}_\beta(h))$ à deux amas dont l'énergie $E_\beta(h)$ appartient au spectre discret de $\tilde{P}^b(h)$. On a :*

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a) = \frac{1}{n_\alpha(\lambda)} \quad [\Im < \tilde{R}(\lambda + i0)\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha, \tilde{\chi}_b^2\tilde{\Pi}_\beta\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha >_X$$

$$-\Im < \tilde{L}_b\tilde{\Pi}_\beta\tilde{\chi}_b\tilde{R}(\lambda + i0)\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha, \tilde{R}(\lambda + i0)\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha >_X]$$

pour $\lambda \in I$, $\lambda > E_\beta(h)$ et $\omega_a \in \mathbb{S}_a$. On a posé : $\tilde{\Pi}_\beta = \tilde{\mathcal{J}}_\beta\tilde{\mathcal{J}}_\beta^*$. Si l'on a, de plus, $b = a$ et $E_\beta(h) \to E_{j_\beta}$ $(1 \leq j_\beta \leq r)$ quand $h \to 0$ alors on a :

$$\sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda,\omega) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \quad [\Im < \Pi R^{AD}(\lambda + i0)L^{AD}e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\Pi L^{AD}e_\alpha >$$

$$-\Im < L^{AD}\Pi_\beta\chi\Pi R^{AD}(\lambda + i0)L^{AD}e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda + i0)L^{AD}e_\alpha >]$$

pour $\lambda \in I$, $\lambda > E_\beta(h)$ et $\omega \in S^{n-1}$. On a repris les notations utilisées dans les théorèmes 3.4.1 et 3.4.5.

Remarque 5.1.2. *Cette expression de $\sigma_{\beta\alpha}$ a déjà été établie dans [I2] dans le cas où $\beta = \alpha$.*

Démonstration : On reprend les preuves des théorèmes 3.4.1 et 3.4.5 après avoir modifié l'expression des opérateurs d'onde correspondants (cf. l'annexe E). $\square$

On s'intéresse aux sections efficaces totales qui sont susceptibles d'avoir un équivalent "adiabatique". On se place donc dans le cas où $b = a$ et on considère un canal β associé à la décomposition a et dont l'énergie tend, quand h tend vers 0, vers E_{j_β}, l'une des valeurs propres du spectre discret de $P^a(0)$ considérée au paragraphe 4.4. Pour plus de commodité dans la comparaison de ces sections efficaces totales avec leur équivalent "adiabatique", on va réécrire les expressions donnant σ_α et $\sigma_{\beta\alpha}$ en terme de la résolvante $R(\lambda + i0)$, c'est-à-dire en utilisant les variables $(x, y) \in I\!R^{n(N+1)}$. Soient $\lambda \in I$ et $\omega_a \in \mathbb{S}_a$. Avec les notations du paragraphe 3.1, on a $\omega_a = u_a(h\omega)$ pour un certain $\omega \in S^{n-1}$. Pour tout $x \in I\!R^n$, on a aussi $< x_a, \omega_a >_q = h^{-1}x \cdot \omega$ si $x_a = u_a(x)$. On a donc :

$$\tilde{e}_\alpha(u_a(x), u^a(y)) = e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda)x\cdot\omega}\tilde{\phi}_\alpha(u^a(y)),\ \forall (x, y) \in I\!R^{n(N+1)}.$$

Par construction de $\tilde{I}_a$, on a :

$$\tilde{I}_a(u_a(x), u^a(y)) = I_a(x, y),\ \forall (x, y) \in I\!R^{n(N+1)}.$$

Par conséquent, on peut écrire :

$$U_a^a \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha = N_a(h) I_a e_\alpha$$

avec $e_\alpha(x, y) = e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda)x\cdot\omega}\phi_\alpha(y)$. On en déduit la nouvelle expression de la section efficace totale $\sigma_\alpha(\lambda, \omega_a)$, notée $\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h)$:

$$\begin{aligned}
\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) &= \frac{1}{n_\alpha(\lambda)} \Im < U_a^a \tilde{R}(\lambda + i0)(U_a^a)^{-1} U_a^a \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha, U_a^a \tilde{I}_a \tilde{e}_\alpha >_X \\
&= \frac{N_a(h)^2}{n_\alpha(\lambda)} \Im < R(\lambda + i0) I_a e_\alpha, I_a e_\alpha > \\
&= \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \Im < R(\lambda + i0; h) I_a e_\alpha, I_a e_\alpha >,
\end{aligned}$$

où $C(h)$ tend vers $C \neq 0$ et $n_\alpha(\lambda)$ tend vers $(\lambda - E_{j_\alpha})^{1/2}$, lorsque $h \to 0$. Rappelons qu'avec la même constante $C(h)$, on a, d'après le théorème 3.3.3 :

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \Im < R^{AD}(\lambda + i0; h) V^{AD} e_\alpha, V^{AD} e_\alpha >,$$

avec $V^{AD} = P^{AD} - P_a$.

De la même manière, on peut écrire la section $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a)$, notée $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h)$, sous la forme suivante :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \quad [\Im < R(\lambda + i0)L_a e_\alpha, \chi_a^2 \Pi_\beta L_a e_\alpha >$$

$$-\Im < L_a \Pi_\beta \chi_a R(\lambda + i0)L_a e_\alpha, R(\lambda + i0)L_a e_\alpha >],$$

avec $\chi_a = \tilde{\chi}_a \circ u_a$, $L_a = P\chi_a - \chi_a P_a$ et Π_β est la projection orthogonale sur la droite engendrée par $\phi_\beta = U^a \tilde{\phi}_\beta$.

A partir de ces expressions, on va montrer les deux théorèmes suivants :

Théorème 5.1.3. *On se place sous l'hypothèse (D_ρ), $\rho > \frac{n+1}{2}$, pour les potentiels et sous l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$ pour chaque E_j $(1 \leq j \leq r)$. On suppose, de plus, que l'hypothèse de "non-croisement" (NC) est satisfaite, pour tout j. Sous l'hypothèse (G), prenons un intervalle compact I vérifiant la propriété (NCG) précédente et considèrons le canal α donné par (A). Uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$, on a :*

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)})$$

et il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que :

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) - \sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)+1+\epsilon_0}),$$

avec $\gamma = \frac{1}{\rho-1}$.

Théorème 5.1.4. *Sous l'hypothèse (D_ρ), $\rho > \frac{n+1}{2}$, pour les potentiels, l'hypothèse de stabilité semi-classique $(HS(h))$ et l'hypothèse de "non-croisement" (NC) pour chaque E_j, l'hypothèse (G) pour E_r et la propriété (NCG) pour I, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait, uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$:*

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h) - \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda, \omega; h) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)+1+\epsilon_0}),$$

où α est le canal défini par (A) et $\beta = (a, E_\beta(h), \phi_\beta(h))$, dont l'énergie $E_\beta(h)$ tend vers E_{j_β} $(1 \leq j_\beta \leq r)$ lorsque h tend vers 0. On a posé $\gamma = \frac{1}{\rho-1}$.

A partir de ces deux théorèmes, on peut donner une estimation des autres sections efficaces totales, du moins de celles qui existent (cf. le début du paragraphe 3.4). Tout d'abord, remarquons que, pour $\lambda \in I$, les canaux $\beta = (a, E_\beta(h), \phi_\beta(h))$ dont l'énergie $E_\beta(h)$ ne tend pas vers l'une des E_j lorsque h tend vers 0 sont "fermés" c'est-à-dire que l'on a : $I \cap I_\beta(h) = \emptyset$ pour tout h petit. A cause de la définition de σ_α, si une section efficace totale $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a)$ est définie pour un certain angle d'incidence ω_a (et $\lambda \in I$), alors on a forcément :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a) \leq \sigma_\alpha(\lambda, \omega_a) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)}).$$

Mais les deux théorèmes précédents disent plus. En effet, si le canal de sortie β n'est pas "adiabatique" (si $b \neq a$), alors on a la majoration suivante :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_a) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)+1+\epsilon_0}) \qquad (5.1; 1)$$

pour un certain $\epsilon_0 > 0$. Ce fait résulte de l'égalité suivante :

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) = \sum_\beta \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda,\omega;h)$$

la sommation portant sur les canaux "adiabatiques" $\beta = (a, E_\beta(h), \phi_\beta(h))$ dont l'énergie $E_\beta(h)$ tend vers l'une des E_j lorsque h tend vers 0, combinée avec les deux approximations précédentes.

En somme, la diffusion à partir du canal α est essentiellement "adiabatique". On verra au paragraphe 5.4 lequel de ces canaux "adiabatiques" contribue le plus à cette diffusion.

5.2 Preuve du théorème 5.1.3

L'objet de ce paragraphe est de prouver le théorème 5.1.3. On reprend la démarche suivie dans [RW] et [RT]. On introduit une partition de l'unité de l'espace des configurations des amas ($I\!R^n_x$), dépendante de h. Cette partition permet de découper les sections efficaces totales en plusieurs termes que l'on va évaluer séparément. La preuve se décompose en plusieurs étapes.

On va en fait prouver, en parallèle, la deuxième estimation de ce théorème 5.1.3 et la suivante :

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)}).$$

On considère une partition de l'unité sur $I\!R^n$, dépendante de h, du type suivant. Soient $\delta > 0$ et $\eta = (1+\delta)\gamma$. Soient $\chi_j \in C^\infty(I\!R^n; I\!R)$, pour $j \in <1;3>$, telles que :

$$\begin{array}{lllllll}
\sum_{j=1}^{3} \chi_j & = & 1 & , \quad 0 \leq & \chi_j & \leq 1 \quad \text{pour} & j \in <1;3>, \\
\\
supp\chi_1 & \subset & \{|x| < 2h^{-\gamma}\} & , & \chi_1 = 1 & \text{sur} & \{|x| < h^{-\gamma}\}, \\
supp\chi_2 & \subset & C_{\gamma\eta} \equiv \{h^{-\gamma} < |x| < 3h^{-\eta}\} & , & \chi_2 = 1 & \text{sur} & \{2h^{-\gamma} < |x| < 2h^{-\eta}\}, \\
supp\chi_3 & \subset & \{|x| > 2h^{-\eta}\}. & & & &
\end{array}$$

On impose de plus que :

$$\forall \alpha \in I\!N^n, \exists D_\alpha > 0; \forall j \in <1;3>, |\partial_x^\alpha \chi_j(x)| \leq D_\alpha < x >^{-|\alpha|}$$

uniformément en h. Ceci est possible car les ensembles où l'on a $\chi_j = 0$ et $\chi_j = 1$ s'éloignent l'un de l'autre. On décompose les deux sections de la façon suivante :

$$\sigma_\alpha(\lambda,\omega;h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1\leq j,k\leq 3} \sigma_{jk}(\lambda,\omega;h),$$

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1\leq j,k\leq 3} \sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h),$$

avec :

$$\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h) = \Im < R(\lambda+i0;h)\chi_j I_a e_\alpha, \chi_k I_a e_\alpha >,$$

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) = \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j V^{AD} e_\alpha, \chi_k V^{AD} e_\alpha >,$$

pour $j,k \in< 1;3 >$. Notons que, compte tenu des remarques 3.3.4 et 3.3.5, σ_{jk}^{AD} est aussi donnée par :

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) = \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j \Pi V^{AD} e_\alpha, \chi_k \Pi V^{AD} e_\alpha > .$$

En effet, comme $\Pi\hat{\Pi} = 0$, on a :

$$\begin{aligned} \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j V^{AD} e_\alpha, \chi_k V^{AD} e_\alpha > &= \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j \Pi V^{AD} e_\alpha, \chi_k \Pi V^{AD} e_\alpha > \\ &\quad + \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j \hat{\Pi} e_\alpha, \chi_k \hat{\Pi} e_\alpha > \end{aligned}$$

et, par la remarque 3.3.5, le dernier terme est nul car $\hat{\Pi}$ est auto-adjoint.

Première étape : On écarte des termes négligeables.

Lemme 5.2.1. *Si l'un des indices est* 3 *alors il existe* $\epsilon_0 > 0$ *tel que :*

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) = O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0})$$

et :

$$\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h) - \sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}),$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ *et* $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : Soient $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, on a, d'après la proposition 4.1.2 :

$$\begin{aligned} || < x >^{s'} \chi_2 \Pi I_a e_\alpha|| &\leq C|| < x >^{-n/2-(s-s')} \mathbb{I}_{supp\chi_2}(x) < x >^{n/2+s-\rho} || \\ &= O(h^{\gamma(\rho-n/2-s)}) = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}) \end{aligned}$$

car $< x >^{-n/2-(s-s')} \in L^2(I\!R_x^n)$ et $\gamma\rho = 1+\gamma$. Comme on a :

$$\Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha = -h^2\Pi(\Delta_x\Pi)e_\alpha - 2in_\alpha(\lambda)h\Pi(\nabla_x\Pi)\cdot\omega e_\alpha,$$

cette même proposition 4.1.2 permet d'écrire :

$$\begin{aligned} || < x >^{s'} \chi_2 \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha|| &\leq Ch|| < x >^{-n/2-(s-s')} \mathbb{I}_{supp\chi_2}(x) < x >^{n/2+s-\rho-1} || \\ &= O(h^{1+\gamma(\rho+1-n/2-s)}) = O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}). \end{aligned}$$

D'après la remarque 3.3.4, on a :

$$\Pi V^{AD} e_\alpha = \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha$$

on en déduit donc que :

$$|| < x >^{s'} \chi_2 \Pi V^{AD} e_\alpha|| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}).$$

De même, on obtient :

$$|| < x >^{s'} \chi_3 \Pi I_a e_\alpha|| = O(h^{\eta(\rho-n/2-s)}) = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})$$

(car $\eta = (1+\delta)\gamma$),

$$||<x>^{s'} \chi_3\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha|| = O(h^{1+\eta(\rho+1-n/2-s)}) = O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)+\delta\gamma(\rho+1-n/2-s)})$$

et :

$$||<x>^{s'} \chi_3\Pi V^{AD}e_\alpha|| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}).$$

D'après (4.4 ;7), on a donc, pour $j,k \in \{2,3\}$, $(j,k) \neq (2,2)$:

$$\begin{aligned}\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= O(h^{-1})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s) > 0$ pour s assez proche de $1/2$. De plus, on a, grâce à (4.4 ;9) :

$$\begin{aligned}\Im < (R(\lambda+i0;h) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))\chi_j I_a e_\alpha, \chi_k I_a e_\alpha > &= O(h^0)O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &\quad O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\end{aligned}$$

et les autres termes de la différence $\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h) - \sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ sont du type :

$$\begin{aligned}\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha, \chi_k I_a e_\alpha > &= O(h^{-1})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})\\ &\quad O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(1-2s)}).\end{aligned}$$

Il reste donc à estimer les termes faisant intervenir χ_1 et χ_3. Pour cela, on transforme l'expression de $R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_1 V^{AD}e_\alpha$ en utilisant la proposition 3.3.6. On en déduit donc que :

$$\begin{aligned}\sigma_{13}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= \Im < \chi_1 e_\alpha, \chi_3 V^{AD}e_\alpha > + \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h))[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi_3 V^{AD}e_\alpha >,\\ &= \Im < R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi_3 V^{AD}e_\alpha >\end{aligned}$$

car $\chi_1\chi_3 = 0$. Pour évaluer ce dernier terme, calculons :

$$[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha = (h^2(\Delta\chi_1)\Pi + 2h(\nabla\chi_1)\cdot h(\nabla_x\Pi) + 2in_\alpha(\lambda)h(\nabla\chi_1)\cdot\omega\Pi)e_\alpha.$$

D'après les propriétés de χ_1, on a :

$$||<x>^{s'} [\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha|| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned}\sigma_{13}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}),\end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s) > 0$ pour s assez proche de $1/2$. L'étude de $\sigma_{31}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ est similaire en utilisant l'expression de $R^{AD}(\lambda-i0;h))\chi_1 V^{AD}e_\alpha$ de la proposition 3.3.6.

On étudie maintenant la différence $\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ pour $(j,k)=(1,3)$ (ce sera analoque pour $(j,k)=(3,1)$). D'après la proposition 3.3.6, on a :

$$\sigma_{13}(\lambda,\omega;h)=\Im<R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3 I_a e_\alpha>$$

On est donc ramené à estimer la différence :

$$\Im<R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3 I_a e_\alpha>-\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha,\chi_3 V^{AD}e_\alpha>$$

soit :

$$\begin{aligned}\Im<R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3 I_a e_\alpha> &- \Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3 V^{AD}e_\alpha>\\ &- \Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi]e_\alpha,\chi_3 V^{AD}e_\alpha>.\end{aligned}$$

L'ordre en h du dernier terme est :

$$\begin{aligned}-1+2+\gamma(\rho+2-n/2-s)+\eta(\rho-n/2-s) &= 1+\gamma(1-n)+2+2\gamma\\ &+ \gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s).\end{aligned}$$

(car $[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi]=2h(\nabla\chi_1)\cdot h(\nabla_x\Pi)$). Il s'agit donc d'évaluer la quantité :

$$\Im<(R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3 I_a e_\alpha>$$

$$-\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_3[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha>.$$

D'après les arguments précédents, l'ordre de ces deux termes est, respectivement :

$$\begin{aligned}0+1+\gamma(1-n/2-s)+\eta(\rho-n/2-s) &= 1+\gamma(1-n)+1\\ &+ \gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\eta(\rho+1-n/2-s) &= 1+\gamma(1-n)+1+\gamma\\ &+ \gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho+1-n/2-s),\end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)>0$ pour s assez proche de $1/2$, ce qui achève la preuve. □

Deuxième étape : On pose $f_1=2in_\alpha(\lambda)h(\nabla\chi_1)\cdot\omega$ et $f_2=\chi_2 I_a^0$, avec $I_a^0=I_a|_{y=0}$. On a alors le :

Lemme 5.2.2. *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, pour tout $1\leq j,k\leq 2$, on ait :*

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)=\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_je_\alpha,f_ke_\alpha>+O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0})$$

et :

$$\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)=\Im<(R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))f_je_\alpha,f_ke_\alpha>+O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})$$

uniformément par rapport à $\lambda\in I$ et $\omega\in S^{n-1}$.

Démonstration : Commençons par σ_{11}^{AD}. D'après la proposition 3.3.6, on a :

$$\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h) = \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha > .$$

En écrivant :

$$[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha = f_1\Pi e_\alpha - 2ih(\nabla\chi_1)\cdot ih(\nabla_x\Pi)e_\alpha + h^2(\Delta\chi_1)\Pi e_\alpha$$

et en utilisant la décroissance en x, uniforme en h, de $\nabla\chi_1$, $\Delta\chi_1$ et de $(\nabla_x\Pi)$, on voit que l'on a :

$$\begin{aligned}
&\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h) - \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_1 e_\alpha, f_1 e_\alpha > \\
&\quad = O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+2+\gamma(2-n/2-s)}) \\
&\quad = O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma})
\end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+1+\gamma > 0$ pour s assez proche de $1/2$. De plus, toujours grâce à la proposition 3.3.6, on a :

$$\begin{aligned}
&\sigma_{11}(\lambda,\omega;h) - \sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h) \\
= &\ \Im < R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha, [\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha > \\
- &\ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha > \\
= &\ \Im < (R(\lambda+i0;h) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha, [\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha > \\
- &\ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi]e_\alpha, [\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha > \\
- &\ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi]e_\alpha >
\end{aligned}$$

avec $|| < x >^{\rho+2} [[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi]|| = O(h^2)$ d'après la proposition 4.1.2. L'ordre en h des deux derniers termes est donc :

$$-1+1+\gamma(1-n/2-s)+2+\gamma(\rho+2-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+2\gamma.$$

Quant au premier terme, on l'estime comme $\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ avec un gain en h dû à la différence des résolvantes (cf. (4.4 ;9)). Son ordre en h est donc :

$$1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+\gamma.$$

Passons au cas où $(j,k)=(2,2)$. On a :

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 V^{AD}e_\alpha, \chi_2 V^{AD}e_\alpha > \\
&= \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 I_a e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha > \\
&+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha > \\
&+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 I_a e_\alpha, \chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha > \\
&+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha, \chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha > .
\end{aligned}$$

L'ordre en h des trois derniers termes est :

$$-1+1+\gamma(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma.$$

I_a est composé de potentiels du type $V(x-L(y)-L_h(y))$, où V vérifient (D_ρ) pour $\rho>1$ et $L, L_h : I\!R^{nN} \longrightarrow I\!R^n$ sont linéaires et vérifient $||L|| = O(h^0)$ et $||L_h|| = O(h^2)$. On a :

$$V(x-L(y)-L_h(y))-V(x) = -\int_0^1 (\nabla V)(x-t(L(y)-L_h(y)))\cdot(L(y)+L_h(y))dt.$$

Comme la fonction $y \mapsto (L(y)+L_h(y))\phi_\alpha(y;h)$ appartient à $L^2(I\!R_y^{nN})$ et que sa norme est uniformément bornée en h, on en déduit, uniformément en h :

$$||(I_a(x)-I_a^0(x))e_\alpha||_{L^2(I\!R_y^{nN})} = O(<x>^{-\rho-1}).$$

Ainsi, on a une petite amélioration en h :

$$\begin{array}{rcl} ||<x>^{s'}\chi_2(I_a-I_a^0)e_\alpha|| &=& O(h^{\gamma(\rho+1-n/2-s})\\ &=& O(h^{1+\gamma(2-n/2-s)}), \end{array}$$

pour $1/2 < s' < s < \rho-n/2$, alors que :

$$\begin{array}{rcl} ||<x>^{s'}\chi_2 I_a e_\alpha|| + ||<x>^{s'}\chi_2 I_a^0 e_\alpha|| &=& O(h^{\gamma(\rho-n/2-s})\\ &=& O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}). \end{array}$$

On en déduit donc :

$$\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 I_a e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha > -\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 I_a^0 e_\alpha, \chi_2 I_a^0 e_\alpha >$$

$$\begin{array}{rl} =& O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(2-n/2-s)})\\ =& O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\gamma}) \end{array}$$

et l'estimation annoncée relative à $\sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h)$. D'après le calcul précédent, on a :

$$\begin{array}{rcl} \sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h) &=& \Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2 I_a e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha >\\ && +O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma}). \end{array}$$

L'étude de la différence $\sigma_{22}(\lambda,\omega;h) - \sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ se ramène donc à la différence :

$$\begin{array}{r} \Im < (R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))\chi_2 I_a e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha >\\ -\Im < (R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))\chi_2 I_a^0 e_\alpha, \chi_2 I_a^0 e_\alpha >\\ = \Im < (R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))\chi_2 (I_a-I_a^0) e_\alpha, \chi_2 I_a e_\alpha >\\ +\Im < (R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h))\chi_2 I_a^0 e_\alpha, \chi_2 (I_a-I_a^0) e_\alpha >. \end{array}$$

D'après (4.4 ;9), l'ordre en h de ce terme est :

$$0+\gamma(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-n/2-s)=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma$$

avec $\gamma(1-2s)+\gamma>0$ pour s assez proche de 1/2.

Examinons maintenant $\sigma_{12}^{AD}(\lambda,\omega;h)+\sigma_{21}^{AD}(\lambda,\omega;h)$. On a, d'après la proposition 3.3.6 :

$$\sigma_{12}^{AD}(\lambda,\omega;h)+\sigma_{21}^{AD}(\lambda,\omega;h)$$

$$\begin{aligned}&=\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha,\chi_2V^{AD}e_\alpha>+\Im<\chi_1\chi_2\Pi e_\alpha,V^{AD}e_\alpha>\\&+\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2V^{AD}e_\alpha,[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha>+\Im<V^{AD}e_\alpha,\chi_1\chi_2\Pi e_\alpha>\end{aligned}$$

où la somme des deuxième et quatrième terme est nulle. On estime le premier terme (le troisième se traite de même). Il est :

$$\begin{aligned}&=&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_1e_\alpha,f_2e_\alpha>\\&+&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_1e_\alpha,\chi_2(I_a-I_a^0)e_\alpha>\\&+&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_1e_\alpha,\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha>\\&+&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)(-h^2(\Delta\chi_1))e_\alpha,\chi_2f_2e_\alpha>\\&+&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)(-h^2(\Delta\chi_1))e_\alpha,\chi_2(I_a-I_a^0)e_\alpha>\\&+&&\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)(-h^2(\Delta\chi_1))e_\alpha,\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha>.\end{aligned}$$

L'ordre en h des cinq derniers termes est respectivement :

$$\begin{aligned}-1+1+\gamma(1-n/2-s)+\gamma(\rho+1-n/2-s)&=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\gamma\\-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(\rho+1-n/2-s)&=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma\\-1+2+\gamma(2-n/2-s)+\gamma(\rho-n/2-s)&=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma\\-1+2+\gamma(2-n/2-s)+\gamma(\rho+1-n/2-s)&=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+2\gamma\\-1+2+\gamma(2-n/2-s)+1+\gamma(\rho+1-n/2-s)&=1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+2\gamma.\end{aligned}$$

Pour s assez proche de 1/2, on obtient l'estimation annoncée.

Pour terminer, considérons la différence :

$$\sigma_{12}(\lambda,\omega;h)+\sigma_{21}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{12}^{AD}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{21}^{AD}(\lambda,\omega;h).$$

D'après la proposition 3.3.6, on a :

$$\sigma_{12}(\lambda,\omega;h)+\sigma_{21}(\lambda,\omega;h)$$

$$=\Im<R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_2I_ae_\alpha>+\Im<R(\lambda+i0;h)\chi_2I_ae_\alpha,[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha>.$$

En procédant comme précédemment, on est ramené à estimer la différence :

$$\Im<R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha,\chi_2I_ae_\alpha>-\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha,\chi_2V^{AD}e_\alpha>.$$

Dans la dernière expression de $\Im<\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha,\chi_2V^{AD}e_\alpha>$, les deuxième, quatrième et cinquième termes sont donc à estimer avec la différence des résolvantes, on y gagne un h (cf. (4.4 ;9)). Les troisième et sixième termes sont tous deux d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$ en h pour un $\epsilon_0>0$. La preuve est achevée. $\square$

Troisième étape : Pour $j \in \{1;2\}$, on a les propriétés suivantes :

$$supp f_j \subset C_{\gamma\eta} = \{h^{-\gamma} < |x| < 3h^{-\eta}\} \tag{5.2;1}$$

et :

$$|f_j(x)| = O(< x >^{-\rho}) \tag{5.2;2}$$

uniformément en h.

La première provient des propriétés de support de χ_1 et χ_2. La seconde est claire pour f_2. D'après la décroissance de $\nabla\chi_1$ en x, uniformément en h, il existe une constante c telle que, pour tout x et tout h, on ait :

$$| < x >^{\rho} f_1(x)| \le 2n_\alpha(\lambda)h| < x >^{\rho-1} \mathbb{I}_{\{|x|<2h^{-\gamma}\}}(x)| \, | < x > (\nabla\chi_1)(x)| \le ch^{1-\gamma(\rho-1)} = c.$$

On a donc bien la seconde propriété pour f_1.

Soit $H_\omega = \{x \in I\!\!R^n;\ x\cdot\omega = 0\}$ l'hyperplan vectoriel orthogonal à ω. Pour tout $x \in I\!\!R^n$, on peut écrire de manière unique : $x = x_\omega + (x\cdot\omega)\omega$, où $x_\omega \in H_\omega$ est le paramètre d'impact. Soit $\kappa = (1-2\delta)\gamma$ (δ assez petit). On introduit une nouvelle partition de l'unité, sur $I\!\!R^{n-1}$ cette fois. Soient $\theta_1, \theta_2 \in C^\infty(I\!\!R^{n-1}; I\!\!R)$ telles que :

$$\begin{array}{rcl} \theta_1+\theta_2 = 1 & , & 0 \le \theta_1, \theta_2 \le 1 \\ \theta_1(u) = 1 \text{ si } |u| < 1 & \text{et} & supp\theta_1 \subset \{|u| \le 2\} \end{array}$$

On pose : $f_{jk}(x) = \theta_j(h^\kappa x_\omega) f_k(x)$, pour $j,k \in \{1;2\}$. On a alors le :

Lemme 5.2.3. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que :*

$$\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h) f_{jk}e_\alpha, f_{lm}e_\alpha >= O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0})$$

et :

$$\Im < (R(\lambda+i0;h) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)) f_{jk}e_\alpha, f_{lm}e_\alpha >= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$, dès que $j=1$ ou $l=1$.

Démonstration : Pour $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, on a, pour tout (j,k) :

$$|| < x >^{s'} f_{jk}e_\alpha|| \le c|| < x >^{-n/2-(s-s')} ||h^{\gamma(\rho-n/2-s)} = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}).$$

Par définition de θ_1 et (5.2 ;1), le volume du support de f_{1k} ($k \in \{1;2\}$) est un

$$O(h^{-\eta-(n-1)\kappa}) = O(h^{-n\gamma+\delta\gamma(2n-3)}),$$

ce qui donne l'amélioration suivante :

$$\begin{aligned} || < x >^{s'} f_{1k}e_\alpha|| \le c|| < x >^{(s'-\rho)} \mathbb{I}_{suppf_{1k}}(x)|| &= O(h^{\gamma(\rho-s')-\gamma n/2+\delta\gamma(n-3/2)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n/2-s')+\delta\gamma(n-3/2)}). \end{aligned}$$

Si $j = 1$ ou $l = 1$, on a donc :

$$\begin{aligned}\Im < \Pi R^{AD}(\lambda + i0; h) f_{jk} e_\alpha, f_{lm} e_\alpha > &= O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(1-n/2-s^{'})+\delta\gamma(n-3/2)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-s-s^{'})+\delta\gamma(n-3/2)})\end{aligned}$$

avec $\gamma(1 - s - s^{'}) + \delta\gamma(n - 3/2) > 0$ pour s et $s^{'}$ assez proches de 1/2 (car $n \geq 2$).

Profitant du gain en h dans la différence des résolvantes (cf. (4.4 ;9)), on trouve de même le second résultat. □

Quatrième étape : Il reste donc à évaluer

$$\Im < \Pi R^{AD}(\lambda + i0; h) f_{2k} e_\alpha, f_{2j} e_\alpha >$$

et :

$$\Im < (R(\lambda + i0; h) - \Pi R^{AD}(\lambda + i0; h)) f_{2k} e_\alpha, f_{2j} e_\alpha >$$

pour $j, k \in \{1; 2\}$.

Pour $j \in \{1; 2\}$, on pose :

$$g_j(x) = \int_0^{+\infty} f_{2j}(x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega) e^{-ih^{-1}\int_0^t I_a^0(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds} dt.$$

D'après (5.2 ;1), on intègre en fait sur un compact donc la fonction g_j est bien définie et est C^∞. Par la suite, on va utiliser les propriétés suivantes de g_j :

Proposition 5.2.4. *Pour $j \in \{1; 2\}$, on a :*

$$\begin{aligned} supp g_j &\subset \{h^{-\kappa} < |x_\omega| < 3h^{-\eta}\}, \\ |g_j(x)| + |(\nabla g_j)(x)| &\leq c(h^{-\gamma} + |x_\omega|)^{1-\rho}, \\ |(\nabla g_j)(x)| &= O(h^{\kappa\rho}), \\ |(\Delta g_j)(x)| &= O(h^{2\kappa\rho-1}), \\ 2n_\alpha(\lambda)\omega \cdot (\nabla g_j) + ih^{-1} I_a^0 g_j &= f_{2j}, \end{aligned}$$

où c et les O sont indépendants de x et h.

Démonstration : voir l'annexe E. □

Pour contrôler g_j en fonction de la variable dans la direction de ω, on introduit une nouvelle troncature χ_4 telle que :

$$\chi_4(x) = \zeta(h^\eta x \cdot \omega)$$

où $\zeta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$, vérifie :

$$\begin{aligned} \zeta(t) = 1 \quad &\text{si} \quad |t| \leq M - 1, \\ supp \zeta \quad &\subset \quad \{|t| \leq M\}, \end{aligned}$$

pour un réel M grand devant 1. En particulier, on a, uniformément en x et en h :

$$|(\nabla\chi_4)(x)| \leq ch^\eta, \ |(\Delta\chi_4)(x)| \leq ch^{2\eta}.$$

Notons, de plus, que $\chi_4 = 1$ sur le support de f_{2j} ($j \in \{1;2\}$) d'après la propriété (5.2 ;1) et que :

$$supp\chi_4 g_j \subset \{x \in I\!R^n; \ |x| \leq Rh^{-\eta}\}$$

pour $j \in \{1;2\}$ et un certain $R > M$.

Dans le même esprit que dans la proposition 3.3.6, on construit une approximation de $R(\lambda \pm i0;h)f_{2k}e_\alpha$ et de $\Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)f_{2k}e_\alpha$:

Proposition 5.2.5. *Pour $j \in \{1;2\}$, on a :*

$$\begin{aligned} R(\lambda \pm i0;h)f_{2j}e_\alpha &= ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha - R(\lambda \pm i0;h)r_j e_\alpha, \\ \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)f_{2j}e_\alpha &= ih^{-1}\Pi\chi_4 g_j e_\alpha - \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)r_j^{AD} e_\alpha, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} r_j &= ih^{-1}[-h^2\Delta_x, \chi_4]g_j + ih^{-1}\chi_4(-h^2(\Delta g_j)) + ih^{-1}\chi_4 g_j(I_a - I_a^0) \\ r_j^{AD} &= \Pi r_j + ih^{-1}\Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\chi_4 g_j. \end{aligned}$$

Démonstration : On a :

$$\Pi(P^{AD} - \lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha) = ih^{-1}\Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\chi_4 g_j e_\alpha + \Pi(P - \lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)$$

et :

$$\begin{aligned} (P - \lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha) &= ih^{-1}(-h^2\Delta_x)\chi_4 g_j e_\alpha + ih^{-1}\chi_4 g_j(P^a + I_a - \lambda)e_\alpha, \\ &= ih^{-1}[-h^2\Delta_x, \chi_4]g_j e_\alpha + ih^{-1}\chi_4(-h^2\Delta_x)g_j e_\alpha \\ &\quad + ih^{-1}\chi_4 g_j(E_\alpha + I_a - \lambda)e_\alpha. \end{aligned}$$

Or, d'après la dernière propriété de la proposition 5.2.4 et la valeur de $n_\alpha(\lambda)$, on a la relation :

$$(-h^2\Delta_x)g_j e_\alpha + g_j(E_\alpha + I_a - \lambda)e_\alpha = -h^2(\Delta g_j)e_\alpha + g_j(I_a - I_a^0)e_\alpha - ihf_{2j}e_\alpha.$$

En appliquant la valeur au bord de la résolvante correspondante aux expressions de $\Pi(P^{AD} - \lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)$ et $(P - \lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)$, on trouve les résultats annoncés car la fonction χ_4 vaut 1 sur le support de f_{2j}. $\square$

La qualité de ces approximations est donnée par le :

Lemme 5.2.6. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, pour $j, k \in \{1;2\}$, on ait :*

$$< \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)r_j e_\alpha, f_{2k}e_\alpha >= O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),$$

$$< \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)(r_j^{AD} - r_j)e_\alpha, f_{2k}e_\alpha >= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})$$

et :

$$< (\Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h) - R(\lambda \pm i0;h))r_j e_\alpha, f_{2k}e_\alpha >= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}),$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : On évalue successivement la contribution des termes constituant r_j^{AD} dans l'expression $< \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h) r_j^{AD} e_\alpha, f_{2k} e_\alpha >$.

Pour $1/2 < s^{'} < s < \rho - n/2$, s et s' assez proches de $1/2$, on a :

$$\begin{aligned} \| < x >^{s^{'}} h^{-1}\chi_4 g_j (I_a - I_a^0) e_\alpha \| &\leq Ch^{-1} \| < x >^{s^{'}-\rho-1} \mathbb{I}_{supp \chi_4 g_j}(x) \| O(h^{\gamma(\rho-1)}) \\ &\leq h^{-1} O(h^{\eta(\rho+1-n/2-s)}) O(h^{\gamma(\rho-1)}), \end{aligned}$$

d'après les deux premières propriétés de la proposition 5.2.4. D'autre part, on a :

$$\| < x >^{s^{'}} f_{2k} e_\alpha \| = O(h^{\gamma(\rho-n/2-s)}).$$

Par conséquent, l'ordre en h du terme correspondant est :

$$-1 + \gamma(\rho - n/2 - s) - 1 + \eta(\rho + 1 - n/2 - s) + \gamma(\rho - 1)$$

soit :

$$1 + \gamma(1-n) + \gamma + \gamma(1-2s) + \delta\gamma(\rho + 1 - n/2 - s)$$

avec $\gamma + \gamma(1-2s) + \delta\gamma(\rho + 1 - n/2 - s) > 0$ pour s assez proche de $1/2$.

On a :

$$\| < x >^{s^{'}} h^{-1} \Pi [-h^2 \Delta_x, \Pi] \chi_4 g_j e_\alpha \| = O(h^{\gamma(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-1)})$$

(cf . les propriétés de χ_4, g_j et de Π). L'ordre en h du terme correspondant est donc au moins 1 de plus que le précédent, c'est-à-dire $1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$, ce qui donne la deuxième estimation.

D'après la quatrième propriété de la proposition 5.2.4 et le fait que $supp \chi_4 g_j \subset \{|x| < Rh^{-\eta}\}$, on a :

$$\| < x >^{s^{'}} h \chi_4 (\Delta g_j) e_\alpha \| \leq ch^{2\kappa\rho} \left(\int_{|x|<Rh^{-\eta}} < x >^{2s^{'}} dx \right)^{1/2} = O(h^{2\kappa\rho - (n/2+s^{'})\eta})$$

Le terme correspondant a pour ordre en h :

$$-1 + 2\kappa\rho - (n/2+s^{'})\eta + \gamma(\rho - n/2 - s) = 1 + \gamma(1-n) + 1 + \gamma + \gamma(1 - s - s^{'}) - \delta\gamma(4\rho + n/2 + s^{'}),$$

où $\gamma + \gamma(1 - s - s^{'}) - \delta\gamma(4\rho + n/2 + s^{'}) > 0$ pour δ assez petit et s assez proche de $1/2$.

En vertu de la troisième propriété de la proposition 5.2.4, on voit que :

$$\| < x >^{s^{'}} h (\nabla \chi_4) \cdot (\nabla g_j) e_\alpha \| = O(h^{1+\kappa\rho+\eta(1-n/2-s^{'})})$$

si bien que l'ordre en h du terme correspondant est :

$$-1 + 1 + \kappa\rho + \eta(1 - n/2 - s^{'}) + \gamma(\rho - n/2 - s)$$

soit :

$$= 1 + \gamma(1-n) + 1 + \gamma + \gamma(1 - s - s^{'}) - \delta\gamma(2\rho + n/2 + s^{'}),$$

avec $\gamma+\gamma(1-s-s^{'})-\delta\gamma(2\rho+n/2+s^{'})>0$ pour δ assez petit et s assez proche de 1/2.

Enfin, grâce à la deuxième propriété de la propostion 5.2.4, on a :

$$\begin{aligned}
\|<x>^{s^{'}}h(\nabla\chi_4)g_je_\alpha\|^2 &\leq Ch^{2+2\eta(1-s^{'})}\int_{h^{-\eta}(M-1)}^{h^{-\eta}M}\left(\int_{h^{-\kappa}<|x_\omega|<3h^{-\eta}}<x_\omega>^{2-2\rho}dx_\omega\right)dt,\\
\|<x>^{s^{'}}h(\Delta\chi_4)g_je_\alpha\|^2 &\leq Ch^{2+2\eta(2-s^{'})}\int_{h^{-\eta}(M-1)}^{h^{-\eta}M}\left(\int_{h^{-\kappa}<|x_\omega|<3h^{-\eta}}<x_\omega>^{2-2\rho}dx_\omega\right)dt.
\end{aligned}$$

En effectuant le changement de variable $u=x_\omega/t$ dans les intégrales intérieures et en remarquant que :

$$\int_{\mathbb{R}^{n-1}}<u>^{2-2\rho}du<\infty$$

(car $\rho>\frac{n+1}{2}$), on voit que :

$$\begin{aligned}
\|<x>^{s^{'}}h(\nabla\chi_4)g_je_\alpha\|^2 &\leq C^{'}h^{2+2\eta(1-s^{'})}\int_{h^{-\eta}(M-1)}^{h^{-\eta}M}t^{n-1+2-2\rho}dt=O(h^{2+2\eta(1-s^{'}-n/2-1+\rho)})\\
\|<x>^{s^{'}}h(\Delta\chi_4)g_je_\alpha\|^2 &\leq C^{'}h^{2+2\eta(2-s^{'})}\int_{h^{-\eta}(M-1)}^{h^{-\eta}M}t^{n-1+2-2\rho}dt=O(h^{2+2\eta(2-s^{'}-n/2-1+\rho)}).
\end{aligned}$$

On en déduit que l'ordre en h des termes correspondants vaut (au moins) :

$$-1+\gamma(\rho-n/2-s)+1+\eta(\rho-n/2-s^{'})=1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-s-s^{'})+\delta\gamma(\rho-n/2-s^{'}),$$

avec $\gamma(1-s-s^{'})+\delta\gamma(\rho-n/2-s^{'})>0$ pour s et $s^{'}$ assez proches de 1/2.

Pour obtenir la dernière estimation, il suffit de reprendre les arguments précédents en tenant compte du fait que la différence des résolvantes est d'ordre 0 en h (cf. (4.4 ;9)). □

Cinquième et dernière étape : A l'issue de l'étape précédente, on a établi qu'il existe $\epsilon_0>0$ tel que :

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h)=\frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)}\sum_{1\leq j,k\leq 2}\Im<ih^{-1}\Pi g_je_\alpha,f_{2k}e_\alpha>+O(h^{(1+\gamma)(1-n)+\epsilon_0})\qquad(5.2;3)$$

et :

$$\sigma_\alpha(\lambda,\omega;h)-\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h)=\frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)}\sum_{1\leq j,k\leq 2}\Im<ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha,f_{2k}e_\alpha>+O(h^{(1+\gamma)(1-n)+1+\epsilon_0}),\qquad(5.2;4)$$

uniformément par rapport à $\lambda\in I$ et $\omega\in S^{n-1}$.

Les deux assertions du théorème 5.1.3 découlent donc du :

Lemme 5.2.7. *Pour $1\leq j,k\leq 2$, on a :*

$$<ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha,f_{2k}e_\alpha>=O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma})$$

et :

$$<ih^{-1}\Pi_0g_je_\alpha,f_{2k}e_\alpha>=<ih^{-1}g_j,f_{2k}>=O(h^{1+\gamma(1-n)}),$$

uniformément par rapport à $\lambda\in I$ et $\omega\in S^{n-1}$.

Démonstration : D'après la proposition 4.1.2 et les propriétés de g_j et f_{2k}, on a :

$$\begin{aligned} |< ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha, f_{2k}e_\alpha >| &= h^{-1}|\int <(\Pi(x)-\Pi_0)\phi_\alpha,\phi_\alpha>_{L^2(\mathbb{R}_y^{nN})} g_j(x)f_{2k}(x)dx| \\ &\leq ch^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho} <x>^{-2\rho}\, \mathbb{1}_{C_{\gamma\eta}}(x)dx \\ &\leq c^{'}h^{-1+\gamma(\rho-1)}\int_{h^{-\gamma}}^{+\infty} r^{-2\rho+n-1}dr = c^{'}h^{\gamma(2\rho-n)} = O(h^{2+\gamma(2-n)}). \end{aligned}$$

De la même manière, on peut écrire :

$$|< ih^{-1}g_j, f_{2k} >| \leq ch^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho} <x>^{-\rho}\, \mathbb{1}_{C_{\gamma\eta}}(x)dx.$$

On effectue le changement de variable : $x = x_\omega + s\omega$ et on intègre par rapport à s, en remarquant que $\rho > 1$ et que, sur $C_{\gamma\eta}$, on a : $<x>\geq |x_\omega| + h^{-\gamma} + |s|$. On a donc :

$$|< ih^{-1}g_j, f_{2k} >| \leq ch^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{2-2\rho}dx_\omega \leq c^{'}h^{-1}\int_0^{+\infty}(h^{-\gamma}+r)^{2-2\rho}r^{n-2}dr.$$

En posant $r = h^{-\gamma}r^{'}$, on trouve :

$$|< ih^{-1}g_j, f_{2k} >| \leq c^{'}h^{-1+\gamma(2\rho-2)-\gamma(n-2)-\gamma}\int_0^{+\infty}(1+r^{'})^{2-2\rho}r^{'n-2}dr^{'}$$

où l'intégrale est convergente (cf. $\rho > \frac{n+1}{2}$), soit :

$$|< ih^{-1}g_j, f_{2k} >| = O(h^{1+\gamma(1-n)}).$$

□

5.3 Preuve du théorème 5.1.4

Pour démontrer ce théorème 5.1.4, on suit la stratégie de [I2] qui consiste essentiellement à adapter la démarche du paragraphe 5.2. La preuve se décompose en une série de lemmes.

On utilise la partition de l'unité du paragraphe 5.2 et on choisit :

$$\chi = \chi_b = \chi_a = 1-\chi_1 = \chi_2+\chi_3.$$

On exploitera les résultats et les notations du paragraphe 5.2. Introduisons les notations supplémentaires suivantes :

$$\begin{aligned} \phi_1 &= [-h^2\Delta_x, \chi]e_\alpha + \chi_2 I_a^0 e_\alpha, \\ \phi_2 &= \chi_2(I_a - I_a^0)e_\alpha + \chi_3 I_a e_\alpha, \\ \\ B_1 &= 2h^2|\nabla\chi|^2\Pi_\beta + 2h^2\chi(\Delta\chi)\Pi_\beta, \\ B_2 &= 4\chi h(\nabla\chi)\cdot h\nabla_x\Pi_\beta, \\ B_3 &= \chi^2[\Pi_\beta, I_a - I_a^0], \\ \\ D &= \Pi[\chi\Pi_\beta([-h^2\Delta_x,\Pi])^* - [-h^2\Delta_x,\Pi]\chi\Pi_\beta]\Pi. \end{aligned}$$

Rappelons que l'on a :

$$\begin{array}{rcl} L_a & = & [-h^2\Delta_x, \chi] + \chi I_a, \\ \Pi L^{AD} & = & \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\chi + \Pi L_a. \end{array}$$

On a donc :

$$L_a e_\alpha = \phi_1 + \phi_2.$$

Comme les opérateurs Π_β et I_a^0 commutent, on peut écrire :

$$\chi\Pi_\beta(L_a)^* - L_a\Pi_\beta\chi = B_1 + B_2 + B_3.$$

De plus, on a aussi :

$$\Pi(\chi\Pi_\beta(L^{AD})^* - L^{AD}\Pi_\beta\chi)\Pi = D + \Pi(B_1 + B_2 + B_3)\Pi.$$

Pour estimer les termes faisant intervenir B_2 ou D, on aura besoin des deux estimations suivantes :

$$\begin{array}{rcl} \| < x >^{-s} h\nabla_x R(\lambda \pm i0; h) < x >^{-s} \| & = & O(h^{-1}), \\ \| < x >^{-s} h\nabla_x \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h) < x >^{-s} \| & = & O(h^{-1}), \end{array}$$

pour $s > 1/2$, uniformément pour $\lambda \in I$.

Grâce à la relation (4.2 ;6), la première estimation se déduit de la seconde. Pour obtenir la seconde, remarquons que l'on a, pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$:

$$\begin{array}{rcl} h\nabla_x \Pi R^{AD}(z) & = & h\nabla_x \Pi R^{AD}(i) - (z-i)h\nabla_x \Pi R^{AD}(i)^2 \\ & & -(z-i)^2 h\nabla_x \Pi R^{AD}(i) R^{AD}(z) R^{AD}(i) \end{array}$$

et que les opérateurs $R^{AD}(i)$ et $h\nabla_x \Pi R^{AD}(i)$ sont uniformément bornés (en h) sur les espaces à poids :

$$L^2_s(\mathbb{R}^n_x; L^2(\mathbb{R}^{nN}_y)) \equiv L^2(\mathbb{R}^n_x; L^2(\mathbb{R}^{nN}_y); < x >^{2s} dx)$$

pour tout s (cf. l'annexe A). D'après le théorème 4.4.3, on peut faire tendre z vers $\lambda \in I$ avec $\pm\Im(z) > 0$ pour $s > 1/2$ et obtenir ainsi la seconde estimation.

Posons maintenant :

$$\begin{array}{rcl} Q^1_{\beta\alpha} & = & \Im < R(\lambda + i0)L_a e_\alpha, \chi^2 \Pi_\beta L_a e_\alpha >, \\ Q^{1,AD}_{\beta\alpha} & = & \Im < \Pi R^{AD}(\lambda + i0) L^{AD} e_\alpha, \chi^2 \Pi_\beta \Pi L^{AD} e_\alpha >, \\ Q^2_{\beta\alpha} & = & \dfrac{1}{2i} < (B_1 + B_2 + B_3) R(\lambda + i0) L_a e_\alpha, R(\lambda + i0) L_a e_\alpha >, \\ Q^{2,AD}_{\beta\alpha} & = & \dfrac{1}{2i} < (B_1 + B_2 + B_3 + D) \Pi R^{AD}(\lambda + i0) L^{AD} e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda + i0) L^{AD} e_\alpha > . \end{array}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega;h) &= \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)}(Q^1_{\beta\alpha}+Q^2_{\beta\alpha}),\\ \sigma^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda,\omega;h) &= \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)}(Q^{1,AD}_{\beta\alpha}+Q^{2,AD}_{\beta\alpha}).\end{aligned}$$

On va donc étudier les différences suivantes :

$$\begin{aligned}Q^1_{\beta\alpha}-Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= \Im < (R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha >\\ &-\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0)[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta \Pi L^{AD} e_\alpha >\\ &-\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha >\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}Q^2_{\beta\alpha}-Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3} < B_j(R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha, R(\lambda+i0)L_a e_\alpha >\\ &+ \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3} < B_j\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L_a e_\alpha, (R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha >\\ &- \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3} < B_j\Pi R^{AD}(\lambda+i0)[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha >\\ &- \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3} < B_j\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda+i0)[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha >\\ &- < D\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha > .\end{aligned}$$

Première étape : On écarte quelques termes négligeables.

Lemme 5.3.1. *Il existe* $\epsilon_0>0$ *tel que l'on ait :*

$$Q^1_{\beta\alpha}-Q^{1,AD}_{\beta\alpha} = \Im < (R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))\phi_1, \chi^2\Pi_\beta\phi_1 > +O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}),$$

uniformément par rapport à $\lambda\in I$ *et* $\omega\in S^{n-1}$.

Démonstration : On procède comme dans la preuve du lemme 5.2.1. Prenons $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, s' et s assez proches de $1/2$. Comme on a :

$$\phi_1 = -2ihn_\alpha(\lambda)(\nabla\chi)\cdot\omega e_\alpha - h^2(\Delta\chi)e_\alpha + \chi_2 I^0_a e_\alpha,$$

on peut écrire l'estimation suivante :

$$\begin{aligned}|| < x >^{s'} \phi_1|| &\le Ch|| < x >^{-n/2-(s-s')} \mathbb{1}_{supp(\nabla\chi)}(x) < x >^{n/2+s-1} ||\\ &+Ch^2|| < x >^{-n/2-(s-s')} \mathbb{1}_{supp(\nabla\chi)}(x) < x >^{n/2+s-2} ||\\ &+C|| < x >^{-n/2-(s-s')} \mathbb{1}_{supp\chi_2}(x) < x >^{n/2+s-\rho} ||\\ \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}) + O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}) + O(h^{\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}),\end{aligned}$$

car $\rho\gamma = 1+\gamma$ et $< x >^{-n/2-(s-s')}$ est de carré intégrable. De la même manière, on a :

$$\begin{aligned} || < x >^{s'} \phi_2|| &= O(h^{\gamma(\rho+1-n/2-s)}) + O(h^{\eta(\rho-n/2-s)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(2-n/2-s)}) + O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma)}) \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} || < x >^{s'} \Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]\chi e_\alpha|| &\leq || < x >^{s'} h^2(\nabla_x\Pi)\cdot(\nabla\chi)e_\alpha|| + || < x >^{s'} h^2(\Delta_x\Pi)e_\alpha|| \\ &\quad + n_\alpha(\lambda)|| < x >^{s'} h(\nabla_x\Pi)\cdot\omega e_\alpha|| \\ &= O(h^{2+\gamma(\rho+2-n/2-s)}) + O(h^{2+\gamma(\rho+2-n/2-s)}) + O(h^{1+\gamma(\rho+1-n/2-s)}) \\ &= O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}). \end{aligned}$$

On a donc :

$$\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0)[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\Pi L^{AD}e_\alpha >$$

$$\begin{aligned} &= O(h^{-1+2+\gamma(2-n/2-s)+1+\gamma(1-n/2-s)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+2+\gamma+\gamma(1-2s)}) \end{aligned}$$

avec $1+\gamma+\gamma(1-2s) > 0$ pour s assez proche de 1/2. On a une estimation analogue pour le terme :

$$\Im < \Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha > .$$

Comme la différence des résolvantes est un $O(1)$, on a :

$$\Im < (R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha >$$

$$= O(h^{2+2\gamma(1-n/2-s)}) = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)})$$

ce qui est insuffisant. Mais si l'on retire le terme où ϕ_1 figure deux fois, l'ordre en h des termes restant est :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma)$$

avec $\gamma(1-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma) > 0$ pour s assez proche de 1/2. □

On examine maintenant les termes contenant une résolvante sur chaque facteur :

Lemme 5.3.2. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :*

$$\begin{aligned} Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i} < B_2(R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha, R(\lambda+i0)L_a e_\alpha > \\ &+ \frac{1}{2i} < B_2\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L_a e_\alpha, (R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))L_a e_\alpha > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}), \end{aligned}$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : Tout d'abord, évaluons les B_j et D. Pour $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, s' et s assez proches de $1/2$, on a :

$$\begin{aligned}
\sup_x || < x >^{2s'} B_1(x)|| &\leq C \sup_x |h^2 < x >^{2s'-2} 1\!\!\mathrm{I}_{supp \nabla\chi}(x)| = O(h^{2+\gamma(2-2s')}), \\
\sup_x || < x >^{2s'} h\chi(x)|\nabla\chi(x)|\Pi_\beta|| &= O(h^{1+\gamma(1-2s')}), \\
\sup_x || < x >^{2s'} B_3(x)|| &= O(h^{\gamma(\rho+1-2s')}) = O(h^{1+\gamma(2-2s')}),
\end{aligned}$$

où la norme $|| \cdot ||$ désigne celle des opérateurs bornés sur $L^2(I\!R^{nN}_y)$. Ecrivons D sous la forme :

$$\begin{aligned}
D &= \Pi[\chi\Pi_\beta([-h^2\Delta_x, \Pi])^* - [-h^2\Delta_x, \Pi]\chi\Pi_\beta]\Pi \\
&= 2h\Pi\chi\Pi_\beta(\nabla_x\Pi) \cdot h\nabla_x\Pi + h^2\Pi\chi\Pi_\beta(\Delta_x\Pi)\Pi + 2h^2\Pi(\nabla_x\Pi) \cdot (\nabla\chi)\Pi_\beta\Pi \\
&\quad +2h\chi(\nabla_x\Pi)\Pi_\beta \cdot h\nabla_x\Pi + h^2\Pi(\Delta_x\Pi)\chi\Pi_\beta\Pi.
\end{aligned}$$

On a donc les estimations suivantes :

$$\begin{aligned}
\sup_x || < x >^{2s'} h\chi(x)\Pi_\beta(\nabla_x\Pi)(x)|| &= O(h^{1+\gamma(\rho+1-2s')}) = O(h^{2+\gamma(2-2s')}), \\
\sup_x || < x >^{2s'} h^2(\nabla_x\Pi)(x) \cdot (\nabla\chi)(x)\Pi_\beta|| &= O(h^{2+\gamma(\rho+2-2s')}) = O(h^{3+\gamma(3-2s')}), \\
\sup_x || < x >^{2s'} h^2(\Delta_x\Pi)(x)\chi(x)\Pi_\beta|| &= O(h^{2+\gamma(\rho+2-2s')}) = O(h^{3+\gamma(3-2s')}).
\end{aligned}$$

D'après l'estimation concernant B_1, les termes de $Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha}$ contenant B_1 et une différence des résolvantes sont d'ordre :

$$2 + \gamma(2 - 2s') + 1 + \gamma(1 - n/2 - s) - 1 + 1 + \gamma(1 - n/2 - s)$$

soit :

$$1 + \gamma(1 - n) + 2 + \gamma + \gamma(2 - 2s - 2s')$$

avec $\gamma + \gamma(2 - 2s - 2s') > 0$ pour s, s' assez proches de $1/2$. Les autres termes contenant B_1 sont d'ordre :

$$2 + \gamma(2 - 2s') - 1 + 2 + \gamma(2 - n/2 - s) - 1 + 1 + \gamma(1 - n/2 - s)$$

soit :

$$1 + \gamma(1 - n) + 2 + 2\gamma + \gamma(2 - 2s - 2s')$$

avec $\gamma + \gamma(2 - 2s - 2s') > 0$ pour s, s' assez proches de $1/2$. De la même façon, les termes contenant B_3 et une différence des résolvantes sont d'ordre :

$$1 + \gamma(2 - 2s') + 1 + \gamma(1 - n/2 - s) - 1 + 1 + \gamma(1 - n/2 - s)$$

soit :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \gamma + \gamma(2 - 2s - 2s')$$

avec $\gamma+\gamma(2-2s-2s')>0$ pour s,s' assez proches de $1/2$. Les autres sont d'ordre :

$$1+\gamma(2-2s')-1+2+\gamma(2-n/2-s)-1+1+\gamma(1-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+1+2\gamma+\gamma(2-2s-2s')$$

avec $\gamma+\gamma(2-2s-2s')>0$ pour s,s' assez proches de $1/2$. Le terme contenant D est lui d'ordre :

$$2+\gamma(2-2s')-1+1+\gamma(1-n/2-s)-1+1+\gamma(1-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s-2s')$$

avec $\gamma+\gamma(2-2s-2s')>0$ pour s,s' assez proches de $1/2$. Il reste à évaluer les termes contenant B_2 mais pas de différence de résolvantes. Ils sont d'ordre :

$$1+\gamma(1-2s')-1+2+\gamma(2-n/2-s)-1+1+\gamma(1-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s-2s')$$

avec $\gamma+\gamma(2-2s-2s')>0$ pour s,s' assez proches de $1/2$. $\square$

Lemme 5.3.3. *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que l'on ait :*

$$\begin{aligned} Q^2_{\beta\alpha}-Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i} < B_2(R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))\phi_1, R(\lambda+i0)\phi_1 > \\ &+ \frac{1}{2i} < B_2\Pi R^{AD}(\lambda+i0)\phi_1, (R(\lambda+i0)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0))\phi_1 > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

uniformément par rapport à $\lambda\in I$ et $\omega\in S^{n-1}$.

Démonstration : Tout d'abord, estimons les termes qui restent à l'issue du lemme 5.3.2. D'après les estimations précédentes, ces deux termes sont d'ordre :

$$1+\gamma(1-2s')+1+\gamma(1-n/2-s)-1+1+\gamma(1-n/2-s)$$

soit :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(2-2s-2s')$$

ce qui est insuffisant. Comme dans la preuve du lemme 5.3.1, on s'aperçoit qu'en retirant les termes où ϕ_1 figure deux fois, les termes restant sont d'ordre :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(2-2s'-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma)$$

avec $\gamma(2-2s'-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma)>0$ pour s',s assez proches de $1/2$. $\square$

Deuxième étape : Dans les lemmes 5.3.1 et 5.3.3, on a montré que l'on pouvait remplacer $L^{AD}e_\alpha$ et $L_a e_\alpha$ par ϕ_1. Mais les trois termes constituant ϕ_1 ne sont pas tous du même ordre (cf la preuve du lemme 5.3.1). La contribution de l'un d'eux, à savoir :

$$-h^2(\Delta\chi)e_\alpha,$$

peut être négligée. Il suffit, en effet, de reprendre les preuves de ces lemmes pour s'apercevoir que cette contribution produit un gain en h de $1+\gamma$. Dans ces deux lemmes, on peut donc remplacer ϕ_1 par la somme suivante :

$$(f_1 + f_2)e_\alpha,$$

où les fonctions f_1 et f_2 sont définie dans la deuxième étape du paragraphe 5.2. En reprenant les notations de la troisième étape de ce paragraphe 5.2, on va voir que, là aussi, la partie des fonctions f_j qui est à support dans une région de petit paramètre d'impact joue un rôle négligeable. C'est l'objet des deux lemmes suivants :

Lemme 5.3.4. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :*

$$\begin{aligned} Q^1_{\beta\alpha} - Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= \Im < (R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))(f_{21}+f_{22})e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta(f_{21}+f_{22})e_\alpha > \\ &\quad + O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : Comme on l'a signalé dans la preuve du lemme 5.3.1, le terme :

$$\Im < (R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))(f_1+f_2)e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta(f_1+f_2)e_\alpha >$$

est d'ordre :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s).$$

D'après la preuve du lemme 5.2.3, on a l'amélioration suivante, pour $k \in \{1,2\}$ et pour $1/2 < s^{'} < s < \rho - n/2$, s', s assez proches de $1/2$:

$$|| < x >^{s^{'}} f_{1k}e_\alpha|| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s^{'})+\delta\gamma(n-3/2)})$$

alors que :

$$|| < x >^{s^{'}} f_{2k}e_\alpha|| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}).$$

Par conséquent, l'ordre en h des termes où figure au moins une fois un facteur f_{1k} pour $k \in \{1,2\}$, est :

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2)$$

avec $\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2) > 0$ pour s', s assez proches de $1/2$. $\square$

Lemme 5.3.5. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :*

$$\begin{aligned} Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i} < B_2(R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))(f_{21}+f_{22})e_\alpha, R(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha > \\ &+ \frac{1}{2i} < B_2\Pi R^{AD}(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha, (R(\lambda+i0) - \Pi R^{AD}(\lambda+i0))(f_{21}+f_{22})e_\alpha > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : Pour $1/2 < s^{'} < s < \rho - n/2$, s', s assez proches de $1/2$, l'ordre en h du terme :

$$< B_2(R(\lambda + i0) - \Pi R^{AD}(\lambda + i0))(f_1 + f_2)e_\alpha, R(\lambda + i0)(f_1 + f_2)e_\alpha >$$

est :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \gamma(2 - 2s' - 2s).$$

Grâce à l'amélioration rappelée dans la preuve du lemme 5.3.4, les termes où figure au moins une fois un facteur f_{1k} pour $k \in \{1, 2\}$ sont d'ordre :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \gamma(1 - 2s') + \gamma(1 - s' - s) + \delta\gamma(n - 3/2)$$

avec $\gamma(1 - 2s') + \gamma(1 - s' - s) + \delta\gamma(n - 3/2) > 0$ pour s', s assez proches de $1/2$. $\square$

Troisième et dernière étape : On utilise maintenant les approximations établies dans la proposition 5.2.5. On reprend donc les notations de la quatrième étape du paragraphe 5.2.

Lemme 5.3.6. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :*

$$Q^1_{\beta\alpha} - Q^{1,AD}_{\beta\alpha} = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : D'après la proposition 5.2.5, on a :

$$\begin{aligned} Q^1_{\beta\alpha} - Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= -\Im < ih^{-1}(\Pi - \Pi_0)(g_1 + g_2)e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta(f_{21} + f_{22})e_\alpha > \\ &\quad +\Im < (R(\lambda + i0) - \Pi R^{AD}(\lambda + i0))(r_1 + r_2)e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta(f_{21} + f_{22})e_\alpha > \\ &\quad -\Im < \Pi R^{AD}(\lambda + i0))(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2)e_\alpha, \chi^2\Pi_\beta(f_{21} + f_{22})e_\alpha > \\ &\quad +O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

car $\chi_4 = 1$ sur le support des f_{2k}. Pour évaluer les deux derniers termes, il suffit de remarquer que les arguments de la preuve du lemme 5.2.6 sont applicables ici puisque $\chi^2\Pi$ est uniformément borné. Leur ordre en h est donc :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \epsilon_0$$

pour un certain $\epsilon_0 > 0$. Pour estimer le premier terme, on peut reprendre les arguments de la preuve du lemme 5.2.7 car la quantité :

$$< (\Pi(x) - \Pi_0)\phi_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\phi_\alpha >_{L^2(\mathbb{R}^{nN}_y)}$$

est un $O(< x >^{-\rho})$ uniformément par rapport à h. L'ordre en h de ce premier terme est donc :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \gamma.$$

$\square$

Lemme 5.3.7. *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait :*

$$Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : On va encore s'appuyer sur la proposition 5.2.5 et les preuves des lemmes 5.2.6 et 5.2.7. On remplace chaque facteur par le terme correspondant donné par la proposition 5.2.5. Considérons tout d'abord les termes suivants :

$$-\frac{1}{2i} < B_2 \Pi R^{AD}(\lambda + i0)(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2)e_\alpha, R(\lambda + i0)(f_{21} + f_{22})e_\alpha >,$$

$$-\frac{1}{2i} < B_2 \Pi R^{AD}(\lambda + i0)(f_{21} + f_{22})e_\alpha, \Pi R^{AD}(\lambda + i0)(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2)e_\alpha > .$$

D'après la preuve du lemme 5.2.6, ils sont d'ordre :

$$1 + \gamma(1 - 2s') - 1 + \gamma(\rho + 1 - n/2 - s) + \gamma(\rho - 1) - 1 + 1 + \gamma(1 - n/2 - s))$$

soit :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \gamma + \gamma(2 - 2s' - 2s)$$

avec $\gamma + \gamma(2 - 2s' - 2s) > 0$ pour s', s assez proches de $1/2$.

Ensuite, prenons les termes qui contiennent au moins un facteur $(r_1+r_2)e_\alpha$. Il contiennent tous une différence de résolvantes. Ils sont donc d'ordre :

$$1 + \gamma(1 - 2s') + m - 1 + 1 + \gamma(1 - n/2 - s))$$

où l'on a :

$$m = \min(-1+\kappa(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-1); 2\kappa\rho-\eta(n/2+s'); 1+\kappa\rho-\eta(n/2+s'); 2\eta(\rho-n/2-s')),$$

d'après les estimations établies dans la preuve du lemme 5.2.6. On peut minorer m par :

$$m \geq 1 + \gamma(1 - n/2 - s) + \min(1, \gamma) - \delta\gamma\tau(s, s')$$

où la fonction τ reste bornée et est positive lorsque s et s' s'approchent de $1/2$. L'ordre en h de tous ces termes est donc supérieur à :

$$1 + \gamma(1 - n) + 1 + \min(1; \gamma) + \gamma(2 - 2s' - 2s) - \delta\gamma\tau(s, s')$$

avec $\min(1; \gamma) + \gamma(2 - 2s' - 2s) - \delta\gamma\tau(s, s') > 0$ pour δ assez petit et s', s assez proches de $1/2$.

Les termes restant à évaluer sont :

$$\frac{1}{2i} < B_2 ih^{-1}\chi_4(g_1 + g_2)(\Pi_0 - \Pi)e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1 + g_2)e_\alpha >,$$

$$\frac{1}{2i} < B_2 ih^{-1}\chi_4(g_1 + g_2)\Pi e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1 + g_2)(\Pi_0 - \Pi)e_\alpha >,$$

où B_2 est donné par :

$$4\chi h(\nabla\chi)\cdot h\nabla_x\Pi_\beta.$$

En utilisant les propriétés de χ, de Π et les estimations suivantes :

$$\exists c>0;\ \forall x\in I\!R^n,\ |(\nabla\chi_4)(x)|\le ch^\eta,\ |(\nabla g_1)(x)|+|(\nabla g_2)(x)|\le ch^{\kappa\rho},$$

on voit que ces termes sont égaux à :

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2i} < -4n_\alpha(\lambda)\chi\chi_4(g_1+g_2)(\nabla\chi\cdot\omega)\Pi_\beta(\Pi_0-\Pi)e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)e_\alpha >\\
&+ \frac{1}{2i} < -4n_\alpha(\lambda)\chi\chi_4(g_1+g_2)(\nabla\chi\cdot\omega)\Pi_\beta\Pi e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)e_\alpha >\\
&+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}),
\end{aligned}$$

pour un certain $\epsilon_0>0$. Pour estimer les deux derniers termes, on procède comme dans la preuve du lemme 5.2.7. On majore donc :

$$\left|\frac{1}{2i} < -4n_\alpha(\lambda)\chi\chi_4(g_1+g_2)(\nabla\chi\cdot\omega)\Pi_\beta(\Pi_0-\Pi)e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)e_\alpha >\right|$$

par :

$$\begin{aligned}
& Ch^{-1}\int(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{2-2\rho} < x >^{-\rho-1}\ 1\!\!1_{supp\nabla\chi}(x)dx\\
=\ & C'h^{-1+2\gamma(\rho-1)}\int_{h^{-\gamma}}^{2h^{-\gamma}} r^{-\rho-1+n-1}dr\\
=\ & C'h^{1+\gamma(\rho+1-n)} = O(h^{2+\gamma(2-n)}).
\end{aligned}$$

L'autre terme est contrôlé de la même manière. □

Remarque 5.3.8. *Dans les preuves précédentes, on n'a pas distingué le cas $\beta=\alpha$ du cas $\beta\neq\alpha$. On peut se demander si l'on peut améliorer l'approximation dans le second cas en profitant de l'orthogonalité des canaux. Malheureusement, dans la méthode précédente, l'orthogonalité des canaux n'intervient que dans la dernière étape en ce qui concerne les termes qui contiennent une résolvante sur chaque facteur.*

5.4 Terme dominant de σ_α : prépondérence de la diffusion élastique.

Pour déterminer le terme dominant dans σ_α, on utilise les arguments de [RW] (voir aussi [RT]). La différence essentielle réside dans la présence de l'opérateur Π. Mais le lemme 5.2.7 permet de s'en débarrasser. D'autre part, on peut déterminer quelle section efficace totale produit ce terme dominant, à savoir $\sigma_{\alpha\alpha}$, la section efficace totale décrivant la diffusion élastique.

Commençons par exiber un terme dominant pour σ_α, indépendant des troncatures. Ce terme fait intervenir le potentiel inter-amas I_a. On pourra le comparer avec les termes dominants à haute énergie dégagés dans [W5].

Théorème 5.4.1. *On prend les mêmes hypothèses que dans le théorème 5.1.3. Uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que :*

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = 4C(h)h^{1-n} \int_{\Pi_\omega} \sin^2 \left(\frac{1}{4hn_\alpha(\lambda)} \int_{I\!R} I_a^0(u + s\omega)ds \right) du + O(h^{(1+\gamma)(1-n)+\epsilon_0}),$$

avec $\gamma = \frac{1}{\rho-1}$ et $I_a^0 = I_a|_{y=0}$.

Remarque 5.4.2. *On retrouve donc le terme dominant de [RW], à un coefficient multiplicatif près : $C(h)h^{1-n}$. La dépendance en h du potentiel inter-amas (qui n'existe pas dans [RW]) est annulée car on a :*

$$I_a^0(x; h) = I_a^0(x; 0).$$

Il n'est pas clair que le terme annoncé soit dominant. On considèrera ce point juste après la preuve du théorème.

Démonstration : D'après les relations (5.2 ;3) et (5.2 ;4) et le lemme 5.2.7, on a :

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1 \leq j,k \leq 2} \Im < ih^{-1} g_j, f_{2k} > + O(h^{1-n+\gamma(1-n)+\epsilon_0}).$$

Il reste à exiber un terme dominant dans $\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h)$ qui soit indépendant des troncatures. Pour cela, on réintroduit les termes dont on s'était séparé dans la preuve du théorème 5.1.3.

Avec les notations de la troisième étape du paragraphe 5.2, on replace θ_1, $\chi_1 I_a^0$ et $\chi_3 I_a^0$ dans le calcul :

Lemme 5.4.3. *Si, pour $j \in \{1, 2\}$, on note :*

$$\tilde{g}_j(x) = \int_0^{+\infty} f_j(x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega) e^{-ih^{-1} \int_0^t I_a^0(x - 2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds} dt,$$

alors on a :

$$\sum_{1 \leq j,k \leq 2} \Im < ih^{-1} g_j, f_{2k} > = \Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2), I_a^0 > + O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in \mathbb{S}_a$.

Démonstration : voir l'annexe E. □

On modifie maintenant les termes $\tilde{g}_1$, $\tilde{g}_2$ en réintroduisant les termes abandonnés dans la première étape du paragraphe 5.2.

Lemme 5.4.4. *On pose :*

$$g^\star(x) = \int_0^{+\infty} I_a^0(x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega) e^{-ih^{-1} \int_0^t I_a^0(x - 2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds} dt.$$

Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que :

$$\Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2), I_a^0 > = \Im < ih^{-1} g^\star, I_a^0 > + O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),$$

uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$.

Démonstration : voir l'annexe E. $\square$

Il reste à calculer la quantité $\Im < ih^{-1}g^\star, I_a^0 >$. Pour cela, notons que l'on a l'équivalent pour I_a^0 de la cinquième propriété de la proposition 5.2.4 :

$$2n_\alpha(\lambda)\omega\cdot\nabla g^\star + ih^{-1}I_a^0 g^\star = I_a^0$$

ce qui implique que :

$$\Im < ih^{-1}g^\star, I_a^0 >= -\Im\int 2n_\alpha(\lambda)\omega\cdot\nabla g^\star\,dx$$

puisque I_a^0 est à valeurs réelles. Si, maintenant on pose :

$$\phi(x,t) = e^{-ih^{-1}\int_0^t I_a^0(x-2n_\alpha(\lambda)(t-\tau)\omega)d\tau},$$

on a :

$$\begin{aligned}
ih^{-1}g^\star(x) &= -\int_0^{+\infty}\frac{\partial\phi}{\partial t}(x,t)dt \\
&= 1 - e^{-ih^{-1}\int_0^{+\infty} I_a^0(x-2n_\alpha(\lambda)(t-\tau)\omega)d\tau} \\
&= 1 - e^{-\frac{i}{2n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^s I_a^0(x_\omega+u\omega)du},
\end{aligned}$$

où l'on a posé $x = x_\omega + s\omega$ et effectué un changement de variable dans l'intégrale. Comme $\omega\cdot\nabla$ est en fait une dérivation en s, on obtient :

$$-2n_\alpha(\lambda)\omega\cdot\nabla g^\star = -I_a^0(x_\omega+s\omega)e^{-\frac{i}{2n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^s I_a^0(x_\omega+u\omega)du}.$$

Par conséquent, on a :

$$\begin{aligned}
\Im < ih^{-1}g^\star, I_a^0 > &= -\Im\int_{H_\omega}\int_{I\!R} I_a^0(x_\omega+s\omega)e^{-\frac{i}{2n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^s I_a^0(x_\omega+u\omega)du}dsdx_\omega \\
&= \int_{H_\omega}\int_{I\!R} I_a^0(x_\omega+s\omega)\sin\left(\frac{1}{2n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^s I_a^0(x_\omega+u\omega)du\right)dsdx_\omega \\
&= 4n_\alpha(\lambda)h\int_{H_\omega}\int_{I\!R}\frac{d}{ds}\left(\sin^2\left(\frac{1}{4n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^s I_a^0(x_\omega+u\omega)du\right)\right)dsdx_\omega \\
&= 4n_\alpha(\lambda)h\int_{H_\omega}\sin^2\left(\frac{1}{4n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^{+\infty} I_a^0(x_\omega+u\omega)du\right)dx_\omega.
\end{aligned}$$

La preuve du théorème 5.4.1 est terminée. $\square$

Pourquoi ce terme est-il dominant en général ? Remplaçons momentanément le potentiel I_a^0 par la fonction :

$$V_\epsilon(x) = |x|^{-\rho}\Phi(x/|x|)(1-\chi(x/\epsilon))$$

pour $\epsilon > 0$, pour $\Phi \in C^\infty(S^{n-1}; I\!R)$ et pour une fonction paire $\chi \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ valant 1 près de 0. On s'inspire de [Y]. Après un passage en coordonées sphériques sur H_ω, le terme :

$$\int_{H_\omega}\sin^2\left(\frac{1}{4n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^{+\infty} V_\epsilon(x_\omega+u\omega)du\right)dx_\omega$$

s'écrit :

$$a\int_{S^{n-2}}\int_0^{+\infty}\sin^2\left(\frac{c}{h}\int_{-\infty}^{+\infty}V_\epsilon(r\phi+u\omega)du\right)r^{n-2}dr\,d\phi.$$

En remplaçant V_ϵ par $V_0(x)=|x|^{-\rho}\Phi(x/|x|)$, ce terme a encore un sens et vaut :

$$a'h^{\gamma(1-n)}\frac{\pi}{(n-1)\Gamma(\gamma(n-1))\sin(\pi\gamma(n-1)/2)}\int_{S^{n-2}}|\Omega(\omega,\phi)|^{\gamma(n-1)}d\phi, \qquad (5.4;1)$$

où Γ désigne la fonction "gamma" et où Ω est donnée par :

$$\Omega(\omega,\phi)=\int_0^\pi\Phi(\omega\cos\theta+\phi\sin\theta)\sin^{\rho-2}\theta d\theta.$$

De plus, la différence de ces termes est majorée par :

$$a\int_{S^{n-2}}\int_{r\leq d\epsilon}2|\sin(\psi_0-\psi_\epsilon)\cos(\psi_0+\psi_\epsilon)(\sin(2\psi_0)+\sin(2\psi_\epsilon))|r^{n-2}dr\,d\phi,$$

car la quantité :

$$\psi_0-\psi_\epsilon\equiv\frac{c}{2h}\int_{-\infty}^{+\infty}(V_0-V_\epsilon)(r\phi+u\omega)du$$

est nulle dès que r est grand devant ϵ. Par conséquent, cette différence est contrôlée par $b\epsilon^{n-1}$, qui tend vers 0 lorsque ϵ tend vers 0. En conclusion, le terme considéré est supérieur à la moitié du terme (5.4 ;1) pourvu que ϵ soit assez petit. On voit que ce terme (5.4 ;1) est réellement d'ordre $h^{\gamma(1-n)}$ pour $\Phi=1$ par exemple.

Revenons à I_a^0. En prenant le même potentiel V_ϵ avec $\Phi=1$, on considère les interactions suivantes :

$$\left\{\begin{array}{lcll} V_{ij} & = & e^2V_\epsilon, & \text{si} \quad i\in A_1', j\in A_2',\\ V_{ij} & = & -eZ_1V_\epsilon, & \text{si} \quad i=1, j\in A_2',\\ V_{ij} & = & -eZ_2V_\epsilon, & \text{si} \quad i\in A_1', j=2,\\ V_{12} & = & Z_1Z_2V_\epsilon, & \end{array}\right.$$

où les constantes e, Z_1, Z_2 sont strictement positives. D'après la formule (1.1 ;2) et le fait que $I_a^0(x)=I_a(x,y)|_{y=0}$, on obtient :

$$I_a^0(x)=(e^2|A_1'|\cdot|A_2'|+Z_1Z_2-e|A_2'|Z_1-e|A_1'|Z_2)V_\epsilon(x)$$

soit :

$$I_a^0(x)=(N_1-Z_1)(N_2-Z_2)V_\epsilon(x)$$

avec $N_j=e|A_j'|$, $1\leq j\leq 2$. Dans ces conditions, si l'un des amas est neutre ($N_1=Z_1$ ou $N_2=Z_2$), le potentiel I_a^0 est nul ! mais si chaque amas ne l'est pas alors le terme apparaissant dans ce théorème 5.4.1 est réellement dominant.

A la fin du paragraphe 5.1, on a constaté que la diffusion associée aux canaux "adiabatiques" était la plus importante. L'objet du théorème 5.4.5 suivant est de montrer que, parmi ces canaux "adiabatiques", le canal de sortie α est prépondérent et que le terme dominant de σ_α est produit par la diffusion élastique $\sigma_{\alpha\alpha}$. Dans le cas où le potentiel inter-amas I_a ne dépend pas du paramètre semi-classique h, ce résultat est connu (cf. [I2]). On reprend d'ailleurs la technique utilisée dans [I2].

Théorème 5.4.5. *Sous les hypothèses du théorème 5.1.3, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait, uniformément par rapport à $\lambda \in I$ et $\omega \in S^{n-1}$:*

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) - \sigma_{\alpha\alpha}(\lambda, \omega; h) = O(h^{(1+\gamma)(1-n)+\epsilon_0}).$$

On a toujours $\gamma = \frac{1}{\rho - 1}$.

Démonstration : D'après la preuve du théorème 5.1.3, on a :

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1 \leq j,k \leq 2} \Im < ih^{-1} g_j e_\alpha, f_{2k} e_\alpha > + O(h^{(1+\gamma)(1-n)+\epsilon_0}).$$

Pour obtenir l'estimation cherchée, il suffit donc de prouver l'estimation suivante :

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\lambda, \omega; h) = \frac{C(h)h^{-n}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1 \leq j,k \leq 2} \Re < h^{-1} g_j e_\alpha, f_{2k} e_\alpha > + O(h^{(1+\gamma)(1-n)+\epsilon_0}). \qquad (5.4;2)$$

Pour cela, on reprend la démarche suivie dans le paragraphe 5.3 et on utilise les arguments de la preuve du théorème 5.1.4.

D'après les arguments utilisés dans les preuves des lemmes 5.3.1, 5.3.2, 5.3.3, 5.3.4, 5.3.5, on voit que l'on a :

$$\begin{aligned} Q^1_{\alpha\alpha} &= \Im < R(\lambda + i0)(f_{21} + f_{22})e_\alpha, \chi^2(f_{21} + f_{22})e_\alpha > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \\ Q^2_{\alpha\alpha} &= \frac{1}{2i} < B_2 R(\lambda + i0)(f_{21} + f_{22})e_\alpha, R(\lambda + i0)(f_{21} + f_{22})e_\alpha > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

puisque $\Pi_\alpha e_\alpha = e_\alpha$ et que, cette fois, on n'a pas de différence de résolvantes. On utilise alors la proposition 5.2.5 et on obtient :

$$\begin{aligned} Q^1_{\alpha\alpha} &= h^{-1} \Re < (g_1 + g_2), \chi^2(f_{21} + f_{22}) > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \\ Q^2_{\alpha\alpha} &= \frac{1}{2i} < -4n_\alpha(\lambda)\chi\chi_4(\nabla\chi \cdot \omega)(g_1 + g_2)e_\alpha, ih^{-1}\chi_4(g_1 + g_2)e_\alpha > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \\ &= 2n_\alpha(\lambda)h^{-1} < \chi(\nabla\chi \cdot \omega)(g_1 + g_2), (g_1 + g_2) > \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

car $\chi_4 = 1$ sur la couronne $C_{\eta\gamma}$ donc sur le support de $\nabla\chi$. Or, on a, par intégration par parties :

$$2n_\alpha(\lambda)h^{-1} < \chi(\nabla\chi \cdot \omega)(g_1 + g_2), (g_1 + g_2) >$$

$$\begin{aligned} &= 2n_\alpha(\lambda)h^{-1}\frac{1}{2} < (\omega \cdot \nabla(\chi^2 - 1))(g_1 + g_2), (g_1 + g_2) > \\ &= 2n_\alpha(\lambda)h^{-1}\frac{1}{2} < (1 - \chi^2))(g_1 + g_2), \omega \cdot \nabla(g_1 + g_2) > \\ &= h^{-1}\Re < (1 - \chi^2))(g_1 + g_2), 2n_\alpha(\lambda)\omega \cdot \nabla(g_1 + g_2) > \\ &= h^{-1}\Re < (1 - \chi^2))(g_1 + g_2), (f_{21} + f_{22}) >, \end{aligned}$$

d'après la dernière propriété de la proposition 5.2.4 et le fait que le potentiel I_a^0 est réel. On trouve donc :

$$Q^1_{\alpha\alpha} + Q^2_{\alpha\alpha} = h^{-1}\Re < (g_1 + g_2), (f_{21} + f_{22}) > +O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0})$$

ce qui donne l'estimation (5.4 ;2). $\square$

A Annexe de la partie 1.

Opérateurs bornés sur des espaces à poids.

On se place ici sous les hypothèses du paragraphe 1.3. Comme dans le lemme 1 p. 170 de [RS4] ou bien dans [Kar], on vérifie ici que les opérateurs $\partial_y^\alpha(P^a+i)^{-1}\partial_y^\beta$, pour $|\alpha|+|\beta|\leq 2$, sont bornés sur les espaces à poids :

$$L^2_\delta(I\!R^{nN}_y)\equiv L^2(I\!R^{nN}_y;<y>^{2\delta}dy),$$

pour $\delta\in I\!R$. Sur les même espaces, on vérifie aussi que les opérateurs $\partial_y^\alpha(P_e(x)+i)^{-1}\partial_y^\beta$, pour $|\alpha|+|\beta|\leq 2$, sont uniformément bornés. De plus, on montre que les opérateurs $(P^{AD}+i)^{-1}$ et $\nabla_x\Pi(P^{AD}+i)^{-1}$ sont bornés sur les espaces à poids :

$$L^2_\delta(I\!R^n_x;L^2(I\!R^{nN}_y))\equiv L^2(I\!R^n_x;L^2(I\!R^{nN}_y);<x>^{2\delta}dx).$$

Posons $P_0^a=-\frac{1}{2}\Delta_y+HE$ (avec les notations du paragraphe 1.1). Soient F,G des opérateurs de multiplication (par une fonction) tels qu'ils soient (P_0^a+G)-bornés. Montrons tout d'abord que, pour tout $\delta\in I\!R$, les opérateurs $F(P_0^a+G+i)^{-1}$, $\partial_y^\beta(P_0^a+G+i)^{-1}$, pour $|\beta|\leq 2$, et $\partial_y^\beta(P_0^a+G+i)^{-1}\partial_y^\gamma$, pour $|\beta|=|\gamma|=1$, sont bornés de $L^2_\delta(I\!R^{nN}_y)$ dans lui-même. Par dualité, on peut se limiter au cas où $\delta\geq 0$.

Prenons $0\leq\delta\leq 1$. En notant $(P_0^a+G+i)^{-1}$ par R, on a :

$$<y>^\delta FR<y>^{-\delta}=FR+[<y>^\delta,FR]<y>^{-\delta}.$$

Le commutateur s'écrit :

$$[<y>^\delta,FR]=F[<y>^\delta,R]=FR[P_0^a,<y>^\delta]R$$

puisque F et G commutent avec $<y>^\delta$. Enfin le commutateur $[P_0^a,<y>^\delta]$ est de la forme :

$$\sum_{|\alpha|=1}A_\alpha\partial_y^\alpha+B$$

où les opérateurs de multiplication A_α et B sont bornés puisque l'on suppose $0\leq\delta\leq 1$. L'opérateur $<y>^\delta FR<y>^{-\delta}$ est donc bien borné. De plus, on peut écrire :

$$<y>^\delta\partial_y^\beta R<y>^{-\delta}=\partial_y^\beta R+\partial_y^\beta[<y>^\delta,R]-(\partial_y^\beta<y>^\delta)R<y>^{-\delta}.$$

On en déduit que l'opérateur $<y>^\delta\partial_y^\beta(P_0^a+G+i)^{-1}<y>^{-\delta}$ est aussi borné. En écrivant maintenant :

$$\begin{aligned}<y>^\delta\partial_y^\beta R\partial_y^\gamma<y>^{-\delta} &= -(\partial_y^\beta<y>^\delta)R\partial_y^\gamma<y>^{-\delta}\\ &\quad+\partial_y^\beta R[P_0^a,<y>^\delta]R\partial_y^\gamma<y>^{-\delta}\\ &\quad-\partial_y^\beta R(\partial_y^\gamma<y>^\delta)<y>^{-\delta}+\partial_y^\beta R\partial_y^\gamma,\end{aligned}$$

on voit, d'après les arguments précédents, que l'opérateur est borné. Supposons que, pour $s \leq n$, les opérateurs $< y >^s FR < y >^{-s}$, $< y >^s \partial_y^\beta R < y >^{-s}$ et $< y >^s \partial_y^\beta R \partial_y^\gamma < y >^{-s}$ soient bornés. Prenons encore $0 \leq \delta \leq 1$. On a :

$$< y >^{n+\delta} FR < y >^{-n-\delta} = < y >^n FR < y >^{-n} + < y >^n [< y >^\delta, FR] < y >^{-n-\delta}$$

avec :

$$\begin{aligned} < y >^n [< y >^\delta, FR] < y >^{-n} &= < y >^n FR[< y >^\delta, P_0^a]R < y >^{-n} \\ &= \sum_{|\alpha|=1} < y >^n FR < y >^{-n} \cdot A_\alpha \cdot < y >^n \partial_y^\alpha R < y >^{-n} \\ &\quad + < y >^n FR < y >^{-n} \cdot B \cdot < y >^n \partial_y^\alpha R < y >^{-n} . \end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse de récurrence, on voit que l'opérateur est borné. De même, on peut écrire :

$$\begin{aligned} < y >^{n+\delta} \partial_y^\beta R < y >^{-n-\delta} &= < y >^n \partial_y^\beta < y >^\delta R < y >^{-n-\delta} \\ &\quad - < y >^n (\partial_y^\beta < y >^\delta) R < y >^{-n} \cdot < y >^{-\delta} \end{aligned}$$

où le dernier terme est borné. En commutant $< y >^\delta$ et R, on voit que le premier terme vaut :

$$\begin{aligned} &< y >^n \partial_y^\beta R < y >^{-n} + \sum_{|\alpha|=1} < y >^n \partial_y^\beta R < y >^{-n} \cdot A_\alpha \cdot < y >^n \partial_y^\alpha R < y >^{-n} \cdot < y >^{-\delta} \\ &+ < y >^n \partial_y^\beta R < y >^{-n} \cdot B \cdot < y >^n \partial_y^\alpha R < y >^{-n} \cdot < y >^{-\delta} . \end{aligned}$$

Il est donc borné. De manière analogue, les opérateurs $< y >^{n+\delta} \partial_y^\beta R \partial_y^\gamma < y >^{-n-\delta}$ sont bornés. On a donc établi le résultat par récurrence.

On prend successivement $G = P^a - P_0^a$ et $G = P_e(x) - P_0^a$. D'après la preuve de la proposition 1.3.1, le potentiel G vérifie les hypothèses précédentes (uniformément en x dans le second cas). On obtient donc les résultats relatifs à P^a et à $P_e(x)$.

En ce qui concerne les résultats relatifs à P^{AD}, on reprend les arguments précédents en utilisant le fait que l'opérateur Π commutent avec les $< x >^\delta$ et que l'on a :

$$[P^{AD}, < x >^\delta] = \Pi[-h^2\Delta_x, < x >^\delta]\Pi.$$

Preuve de la proposition 1.2.1.

Comme la fonction $(x, y) \mapsto I_a(x, y)$ est bornée, on en déduit que $I_a(x)(P^a + i)^{-1}$ et $(P_e(x) + i)^{-1}$ sont uniformément bornés par rapport à x, puisque la distance de i aux spectres des opérateurs auto-adjoints P^a et $P_e(x)$ est minorée par 1. Il suffit donc de vérifier que, lorsque $|x| \to \infty$, $I_a(x)(P^a + i)^{-1}$ converge fortement vers 0 c'est-à-dire que :

$$\lim_{|x|\to\infty} I_a(x)(P^a + i)^{-1}\phi = 0,$$

pour $\phi \in \mathcal{S}$. Soit $\psi = (P^a + i)^{-1}\phi$. Le potentiel inter-amas I_a est composé de potentiel de la forme $V(x + L(y))$, où $L \in \mathcal{L}(I\!R^{nN}; I\!R^n)$ et V vérifie (D_ρ), pour un réel $\rho > 0$. On a, d'après (D_ρ) :

$$|V(x - L(y))\psi(y)| \leq C < x - L(y) >^{-\rho} |\psi(y)| \leq C < x >^{-\rho} < L(y) >^{\rho} |\psi(y)|.$$

Comme $(P^a + i)^{-1}$ est borné sur tous les espaces à poids $L^2_s(I\!R^{nN}) \equiv L^2(I\!R^{nN}, < y >^{2s} dy)$ et ϕ appartient à $\mathcal{S}$, la fonction $< L(y) >^{\rho} \psi(y)$ est dans $L^2(I\!R^{nN}_y)$. Le théorème de convergence dominée donne la conclusion annoncée. $\square$

Preuve du lemme 1.2.7.

Soient $(\phi_j)_{1 \leq j \leq m}$ une base orthonormée de $Im\Pi_0$ dans $L^2(I\!R^{nN}_y)$ et $(\psi_p)_p$ une suite convergeant faiblement vers 0 dans $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$. On a :

$$\Pi_0\psi_p(x, y) = \sum_{j=1}^{m} < \phi_j, \psi_p(x, \cdot) >_y \phi_j(y)$$

et :

$$< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} < \phi_j, \psi_p(x, \cdot) >_y \phi_j(y) = \phi_j(y) < x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} < \phi_j, \psi_p(x, \cdot) >_y .$$

Comme $\phi_j \in L^2(I\!R^{nN}_y)$, la suite $(< \phi_j, \psi_p(x, \cdot) >_y)_n$ tend faiblement vers 0 dans $L^2(I\!R^n_x)$ et comme $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}$ est un opérateur compact sur cet espace, on a la convergence vers 0 de $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi_0\psi_p$ pour la norme de $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$. Ainsi $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi_0$ est un opérateur compact sur $L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$.

Le même raisonnement s'applique à l'opérateur $< x >^{-\mu} \nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1}\Pi_0$. Considérons maintenant l'opérateur $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi$. On pose pour $|x|$ grand :

$$\phi_j(x) = \Pi(x)\phi_j.$$

Comme on a :

$$\begin{aligned} < \phi_j(x), \phi_k(x) > &= < \Pi(x)\phi_j, \phi_k > \\ &= \delta_{jk} + < (\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0\phi_j, \phi_k > \\ &= \delta_{jk} + O(< x >^{-\rho}) \end{aligned}$$

d'après la proposition 1.2.4, la famille $(\phi_j(x))_{1 \leq j \leq m}$ est une base de $Im\Pi(x)$ pour $|x| \geq R$, R assez grand. Notons par $(\tilde{\phi}_j(x))_{1 \leq j \leq m}$ la base duale. Soit $\chi \in C^\infty(I\!R^n)$ à support dans $\{|x| > R\}$ et valant 1 au voisinage de l'infini. On a donc :

$$< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi\chi\psi_p = \chi(x)\phi_j(x) \sum_{j=1}^{m} < x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} < \tilde{\phi}_j(x), \psi_n(x, \cdot) >_y$$

$$+ \sum_{j=1}^{m} < x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}[-\Delta_x, \chi(x)\phi_j(x)](-\Delta_x + i)^{-1} < \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) >_y$$

où le commutateur s'écrit $\nabla_x \cdot O(< x >^{-\rho}) + O(< x >^{-\rho})$, d'après la proposition 1.2.4. D'après l'hypothèse sur les ψ_p, la suite $(< \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) >_y)_n$ tend faiblement vers 0 dans $L^2(I\!\!R^n_x)$ et comme l'opérateur $< x >^{-\rho} (-\Delta_x + i)^{-1}$ est compact, on a donc la convergence vers 0 en norme de $(< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi\chi\psi_p)_p$.

D'après la proposition 1.2.3, on peut reprendre ces arguments au voisinage de chaque point. Grâce à une partition finie de l'unité, on en déduit que l'opérateur $< x >^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi$ est compact. Une preuve analogue donne la compacité de : $< x >^{-\mu} \nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1}\Pi$.

Comme l'opérateur $< x >^{-\mu} \Pi(-\Delta_x + i)^{-1}$ est l'adjoint de l'opérateur $(-\Delta_x + i)^{-1} < x >^{-\mu} \Pi$, on voit, en commutant $(-\Delta_x + i)^{-1}$ et $< x >^{-\mu}$, que $< x >^{-\mu} \Pi(-\Delta_x + i)^{-1}$ est aussi compact. De même, l'opérateur $< x >^{-\mu} \Pi\nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1}$ est compact. $\square$

Preuve du lemme 1.2.11.

On note par P_0^{AD} l'opérateur $\Pi(-\Delta_x)\Pi$. La différence :

$$\Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}\Pi - \Pi(-\Delta_x + i)^{-1}\Pi$$

s'écrit :

$$\begin{aligned}
&= \Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}\Pi[\Delta_x, \Pi](-\Delta_x + i)^{-1}\Pi, \\
&= 2\Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}\Pi(\nabla_x\Pi) < x >^{\rho} \cdot < x >^{-\rho} \nabla_x(-\Delta_x + i)^{-1}\Pi \\
&\quad + \Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}\Pi(\Delta_x\Pi) < x >^{\rho} < x >^{-\rho} (-\Delta_x + i)^{-1}\Pi.
\end{aligned}$$

D'après le lemme 1.2.7, on en déduit que les opérateurs :

$$< x >^{-\mu} \Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}, \; < x >^{-\mu} \nabla_x\Pi(P_0^{AD} + i)^{-1}$$

sont compacts et, comme $P^{AD} - P_0^{AD}$ est $P^{AD}-$borné, les deux premiers opérateurs le sont aussi.

D'après les relations suivantes :

$$\left\{\begin{array}{rcl}
< x >^{-\rho} \Pi(P + i)^{-1} &=& < x >^{-\rho} \Pi(P^{AD} + Q^{AD} + i)^{-1}(I - V(P + i)^{-1}), \\
< x >^{-\rho} \nabla_x\Pi(P + i)^{-1} &=& < x >^{-\rho} \nabla_x\Pi(P^{AD} + Q^{AD} + i)^{-1}(I - V(P + i)^{-1}),
\end{array}\right.$$

(V est $P-$borné) et le fait que $\Pi(P^{AD} + Q^{AD} + i)^{-1} = \Pi(P^{AD} + i)^{-1}$, on voit que les deux autres le sont également. $\square$

Preuve de la proposition 1.3.2.

On détaille cette preuve. On montre tout d'abord que l'application $I\!\!R^n \ni k \mapsto V(x + k - L(\cdot))(P_e(x) + i)^{-1}$ est continue.

Posons $y = (y_1, \hat{y})$ avec $y_1 \in I\!\!R^n$. On peut écrire :

$$V(x + k - L(y)) = T_{k,\hat{y}} V(y_1) T_{k,\hat{y}}^{-1}$$

où la transformation $T_{k,\hat{y}}$ est définie par :

$$T_{k,\hat{y}}\phi(y_1) = \phi(x + k - L(y))$$

pour $\phi \in L^2(I\!R^n)$. Ainsi, on a :

$$V(x + k - L(y))(-\Delta_{y_1} + i)^{-1} = CT_{k,\hat{y}}V(y_1)(-\Delta_{y_1} + i)^{-1}T_{k,\hat{y}}^{-1}$$

où la constante C est indépendante de k et de $\hat{y}$. Comme le potentiel V est Δ-compact, comme l'application $k \mapsto T_{k,\hat{y}}$ est uniformément bornée et fortement continue, on en déduit que l'application $k \mapsto V(x + k - L(y))(-\Delta_{y_1} + i)^{-1}$ est continue en norme. De plus, comme les opérateurs $T_{k,\hat{y}}$ sont uniformément bornés en $\hat{y}$, on a, pour toute fonction $f \in L^2(I\!R_y^{nN})$:

$$\int \left(\int |[V(x + k - L(y)) - V(x - L(y))](-\Delta_{y_1} + i)^{-1} f|^2 dy_1 \right) d\hat{y}$$

$$\leq C \int \left(\int |f|^2 dy_1 \right) d\hat{y} = C||f||^2.$$

On en déduit donc la continuité en norme d'opérateur sur $L^2(I\!R_y^{nN})$ de l'application $k \mapsto V(x + k - L(\cdot))(P_e(x) + i)^{-1}$.

Grâce à un argument d'interpolation, on montre que l'application :

$$I\!R^n \ni k \mapsto (|P_e(x)| + 1)^{-1/2} V(x + k - L(\cdot))(|P_e(x)| + 1)^{-1/2}$$

est aussi continue.

Montrons maintenant que l'application $x \mapsto (P_e(x) + i)^{-1}$ est de classe C^1. Soit $k \in I\!R^n$, on étudie la dérivabilité dans la direction k. La différence :

$$(P_e(x + tk) + i)^{-1} - (P_e(x) + i)^{-1}$$

$(t \in I\!R)$ fait intervenir les différences suivantes :

$$V(x + tk - L(y)) - V(x - L(y)) = t(k \cdot \nabla V)(x + \theta k - L(y))$$

avec $|\theta| \leq |t|$. Or, on peut écrire, y p.p. :

$$(\nabla V)(x - L(y)) = [M\nabla_{y_1}, V(x - L(y))]$$

où la matrice M est construite à partir de l'application L et est indépendante de x et de y. D'après les propriétés de continuité précédentes, on voit que la dérivée directionnelle existe et est donnée par :

$$\frac{d}{dt}(P_e(x + tk) + i)^{-1}|_{t=0} = \sum (P_e(x) + i)^{-1}[k \cdot M\nabla_{y_1}, V(x - L(y))](P_e(x) + i)^{-1},$$

la somme portant sur les potentiels constituant I_a. De plus, on voit que les applications $x \mapsto (P_e(x) + i)^{-1}(k \cdot M\nabla_{y_1})$ et $x \mapsto V(x - L(y))(P_e(x) + i)^{-1}$ sont continues.

Pour montrer que l'application $x \mapsto (P_e(x) + i)^{-1}$ est de classe C^2, on procède de la même façon en utilisant les continuités précédentes.

Avec des calculs plus fastidieux encore, on peut vérifier en suivant la même démarche les résultats de la remarque 1.3.3. $\square$

B Annexe de la partie 2.

Preuve de la proposition 2.1.1.

Soient $\phi, \psi \in \mathcal{D}(P^{AD}) \cup \mathcal{D}(A^{AD})$. On a :

$$\begin{aligned} < \psi, i[P^{AD}, A^{AD}]\phi > &= < P^{AD}\Pi\psi, iA^{AD}\Pi\phi > + < iA^{AD}\Pi\psi, P^{AD}\Pi\phi >, \\ &= < \Pi(-\Delta_x)\Pi\psi, iA^{AD}\Pi\phi > + < iA^{AD}\Pi\psi, \Pi(-\Delta_x)\Pi\phi > \\ &\quad + < \Pi P_e\Pi\psi, iA^{AD}\Pi\phi > + < iA^{AD}\Pi\psi, \Pi P_e\Pi\phi > \end{aligned}$$

puisque, d'après la proposition 1.2.4 et le lemme 1.2.11, $\Pi P_e \Pi$ est $P^{AD}-$borné de borne relative 0 et donc que $\mathcal{D}(P^{AD}) = \mathcal{D}(\Pi(-\Delta_x)\Pi)$. D'après le corollaire 1.2.10, on peut transformer l'expression précédente :

$$\begin{aligned} < \psi, i[P^{AD}, A^{AD}]\phi > &= < (-\Delta_x)\Pi\psi, iA\Pi\phi > + < iA\Pi\psi, (-\Delta_x)\Pi\phi > \\ &\quad + < (-\Delta_x)\Pi\psi, i[\Pi, A]\Pi\phi > + < i[\Pi, A]\Pi\psi, (-\Delta_x)\Pi\phi > \\ &\quad + < \Pi P_e\Pi\psi, iA\Pi\phi > + < iA\Pi\psi, \Pi P_e\Pi\phi > \end{aligned}$$

où $i[A, \Pi] = x \cdot (\nabla_x \Pi)$, $\Pi I_a \Pi$ sont des opérateurs bornés (cf. proposition 1.2.4). De plus, $\Pi P^a \Pi = \Pi P_e \Pi - \Pi I_a \Pi$ est aussi borné.

Sur $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(-\Delta_x)$, la forme $i[-\Delta_x, A]$ est représentée par $-2\Delta_x$ donc on a :

$$< (-\Delta_x)\Pi\psi, iA\Pi\phi > + < iA\Pi\psi, (-\Delta_x)\Pi\phi > = < \psi, 2\Pi(-\Delta_x)\Pi\phi > .$$

D'autre part, on a, au sens des distributions :

$$\left\{ \begin{aligned} A\Pi P^a\Pi\phi - \Pi P^a\Pi A\Pi\phi &= [A, \Pi]P^a\Pi\phi + \Pi[A, P^a]\Pi\phi + \Pi P^a[A, \Pi]\Pi\phi \quad \in L^2(I\!\!R^{n(N+1)}_{x,y}), \\ iA\Pi I_a\Pi\phi - \Pi I_a\Pi iA\Pi\phi &= i[A, \Pi]I_a\Pi\phi + \Pi i[A, I_a]\Pi\phi + \Pi I_a[\Pi, A]\Pi\phi \quad \in L^2(I\!\!R^{n(N+1)}_{x,y}), \end{aligned} \right.$$

avec :

$$[A, P^a] = 0,\ i[A, I_a] = x \cdot (\nabla_x I_a),\ i[A, \Pi] = x \cdot (\nabla_x \Pi).$$

On en déduit que :

$$\begin{aligned} < \Pi P_e\Pi\psi, iA\Pi\phi > + < iA\Pi\psi, \Pi P_e\Pi\phi > &= - < \psi, \Pi P_e x \cdot (\nabla_x\Pi)\Pi\phi > \\ &\quad - < \psi, \Pi x \cdot (\nabla_x\Pi)P_e\Pi\phi > \\ &\quad - < \psi, \Pi x \cdot (\nabla_x I_a)\Pi\phi >, \\ &= - < \psi, x \cdot (\nabla_x I_a)\phi > \end{aligned}$$

car $\Pi(\nabla_x\Pi)\Pi = 0$ (cf. remarque 1.2.6). Enfin, d'après la proposition 1.2.4, $-\Delta_x\Pi[A, \Pi]\Pi\phi \in L^2(I\!\!R^{n(N+1)}_{x,y})$. On a donc :

$$\begin{aligned} < \psi, i[P^{AD}, A^{AD}]\phi > &= < \psi, 2\Pi(-\Delta_x)\Pi\phi > - < \psi, \Pi(-\Delta_x)x \cdot (\nabla_x\Pi)\Pi\phi > \\ &\quad - < \psi, \Pi x \cdot (\nabla_x\Pi)(-\Delta_x)\Pi\phi > - < \psi, \Pi x \cdot (\nabla_x I_a)\Pi\phi > . \end{aligned}$$

D'après la proposition 1.2.4, $\Pi x \cdot (\nabla_x I_a) < x >^\rho$ est borné, donc, grâce au lemme 1.2.11, $\Pi x \cdot (\nabla_x I_a)\Pi$ est $P^{AD}-$compact. D'autre part, l'opérateur $\Pi x \cdot (\nabla_x \Pi)(-\Delta_x)\Pi$ s'écrit :

$$\Pi x \cdot (\nabla_x \Pi)\hat{\Pi}(\Pi(-\Delta_x) + 2(\nabla_x \Pi) \cdot \nabla_x + (\Delta_x \Pi))\Pi$$

$$= 2\Pi(x \cdot (\nabla_x \Pi))(\nabla_x \Pi) < x >^\rho \cdot < x >^{-\rho} \nabla_x \Pi + \Pi(x \cdot (\nabla_x \Pi))(\Delta_x \Pi) < x >^\rho < x >^{-\rho} \Pi$$

(on a utilisé la remarque 1.2.6). Il est donc $P^{AD}-$compact. Par conséquent, l'opérateur symétrique $\Pi(-\Delta_x)\Pi - \Pi(-\Delta_x)(x \cdot (\nabla_x \Pi))\Pi - \Pi(x \cdot (\nabla_x \Pi))(-\Delta_x)\Pi - \Pi x \cdot (\nabla_x I_a)\Pi$ est auto-adjoint sur $\mathcal{D}(\Pi(-\Delta_x)\Pi) = \mathcal{D}(P^{AD})$ et est borné inférieurement. On en déduit que la forme considérée est bornée inférieurement et est fermable, que $\mathcal{D}(P^{AD}) \subset \mathcal{D}(i[P^{AD}, A^{AD}]^\circ)$ et que l'on a la relation (2.1 ;2). $\square$

Preuve du corollaire 2.1.3.

Soient $\phi, \psi \in \mathcal{S}$, on a :

$$< \psi, A^{AD}(P^{AD} - z)^{-1}(A^{AD} - z)^{-1}\phi >$$

$$=< \psi, (P^{AD}-z)^{-1}A^{AD}(A^{AD}-z)^{-1}\phi > + < \psi, (P^{AD}-z)^{-1}[P^{AD}, A^{AD}](P^{AD}-z)^{-1}(A^{AD}-z)^{-1}\phi > .$$

D'après la proposition 2.1.1, l'opérateur fermé $A^{AD}(P^{AD} - z)^{-1}(A^{AD} - z)^{-1}$ est borné donc on a : $(P^{AD} - z)^{-1}\mathcal{D}(A^{AD}) \subset \mathcal{D}(A^{AD})$.

Pour $\lambda \neq 0$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} &(A^{AD} + i\lambda)^{-1}(P^{AD} + i)^{-1} - (P^{AD} + i)^{-1}(A^{AD} + i\lambda)^{-1} \\ &= (A^{AD} + i\lambda)^{-1} \left((P^{AD} + i)^{-1}A^{AD} - A^{AD}(P^{AD} + i)^{-1}\right)(A^{AD} + i\lambda)^{-1} \\ &= (A^{AD} + i\lambda)^{-1}(P^{AD} + i)^{-1}[P^{AD}, A^{AD}]^\circ(P^{AD} + i)^{-1}(A^{AD} + i\lambda)^{-1}. \end{aligned}$$

Toujours d'après la proposition 2.1.1, $[P^{AD}, A^{AD}]^\circ(P^{AD} + i)^{-1}$ est borné donc, pour $|\lambda|$ assez grand, l'opérateur borné :

$$B(\lambda) = [P^{AD}, A^{AD}]^\circ(P^{AD} + i)^{-1}(A^{AD} + i\lambda)^{-1}$$

est de norme < 1. On a donc :

$$(A^{AD} + i\lambda)^{-1}(P^{AD} + i)^{-1} = (P^{AD} + i)^{-1}(A^{AD} + i\lambda)^{-1}(1 - B(\lambda))^{-1}$$

d'où l'on déduit que : $(A^{AD} + i\lambda)^{-1}\mathcal{D}(P^{AD}) \subset \mathcal{D}(P^{AD})$. De plus, pour $|\lambda|$ assez grand, $(1 - B(\lambda))^{-1}$ est uniformément borné en λ et on a la convergence forte :

$$\begin{aligned} i\lambda(A^{AD} + i\lambda)^{-1} &\rightarrow 1, \\ |\lambda| &\rightarrow \infty \end{aligned}$$

ce qui implique la convergence forte souhaitée. $\square$

Un argument de la preuve du théorème 2.1.6.

On va vérifier que, pour $s \in [0, 1]$, l'opérateur $< A^{AD} >^s (P^{AD} + i)^{-1} < x >^{-s}$ est borné.

On procède par interpolation (cf. [RS1]). Soient $\phi, \psi \in \mathcal{S}(I\!R^n_x; L^2(I\!R^{nN}_y))$. La fonction :

$$\mathbb{C} \ni s \mapsto f(s) = << A^{AD} >^s (P^{AD} + i)^{-1} < x >^{-s} \phi, \psi >$$

est analytique sur $\{s \in \mathbb{C};\ 0 < \Re(s) < 1\}$ et continue bornée sur $\{s \in \mathbb{C};\ 0 \leq \Re(s) \leq 1\}$ (on a utilisé le fait que $< x >^{-s}$ et $(P^{AD}+i)^{-1}$ conserve le domaine de A^{AD}, cf. corollaire 2.1.3). Ensuite, la fonction f est uniformément bornée sur $\{s \in \mathbb{C};\ \Re(s) = 0\}$ par $c_0||\phi|| \cdot ||\psi||$. Sur $\{s \in \mathbb{C};\ \Re(s) = 1\}$, elle est aussi uniformément bornée par $c_1||\phi|| \cdot ||\psi||$ car l'opérateur $A^{AD}(P^{AD} + i)^{-1} < x >^{-1}$ est borné. Ce dernier point résulte des arguments utilisés dans l'annexe A. Par le théorème des trois lignes d'Hadamard, on en déduit qu'il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout s avec $0 \leq \Re(s) \leq 1$, on ait :

$$| << A^{AD} >^s (P^{AD} + i)^{-1} < x >^{-s} \phi, \psi > | \leq C||\phi|| \cdot ||\psi||.$$

Par densité, on a donc le résultat. $\square$

Preuve de la proposition 2.3.6.

Il reste à montrer l'inclusion :

$$\sigma(P^{AD}_0) \subset \{0\} \cup [E_0; +\infty[.$$

Soit $\chi \in C^\infty_0(I\!R \setminus \{0\})$. Comme $Im\hat{\Pi} \subset KerP^{AD}_0$ (le noyau de P^{AD}_0), on a : $\chi(P^{AD}_0)\hat{\Pi} = 0$. Pour toute fonction $\phi \in L^2(I\!R^{n(N+1)}_{x,y})$ et $\lambda \in I\!R$, on peut écrire :

$$\chi(P^{AD}_0)(P^{AD}_0 - \lambda)\phi = (P^{AD}_0 - \lambda)\chi(P^{AD}_0)\Pi\phi = \Pi(-h^2\Delta_x + E_0 - \lambda)\Pi\chi(P^{AD}_0)\phi.$$

Donc, si $\lambda < E_0$, on a :

$$< (P^{AD}_0 - \lambda)\chi(P^{AD}_0)\phi, \chi(P^{AD}_0)\phi > \geq \frac{E_0 - \lambda}{2}||\chi(P^{AD}_0)\phi||^2. \qquad (B;1)$$

Si $\lambda \in \sigma(P^{AD}_0)$ avec $\lambda < E_0$ alors, par le "petit" théorème de Weyl (cf [RS1]), il existe une suite (ϕ_n) d'états normalisés, avec $\phi_n \in \mathcal{D}(P^{AD}_0)$, telle que $||(P^{AD}_0 - \lambda)\phi_n||$ tendent vers 0 quand $n \to \infty$. Bien sûr, on a aussi $||\chi(P^{AD}_0)(P^{AD}_0 - \lambda)\phi_n|| \to 0$ et, d'après (B ;1), $||\chi(P^{AD}_0)\phi_n|| \to 0$.

D'autre part, si l'on considère une fonction $\theta \in C^\infty_0(I\!R)$ qui vaut 1 près de λ, on a cette fois la convergence : $||(1 - \theta)(P^{AD}_0)\phi_n|| \to 0$ (cf. la preuve du "petit" théorème de Weyl dans [RS1]).

Ces deux convergences vers 0 ne sont compatibles que si $\lambda = 0$. Ceci prouve que l'on a $\sigma(P^{AD}_0) \subset \{0\} \cup [E_0; +\infty[$. $\square$

C Annexe de la partie 3.

Preuve du lemme 3.2.1.

Prenons un réel δ tel que $0 < \delta < d(0, supp\hat{u})$, la distance de 0 au support de $\hat{u}$, la transformée de Fourier de u. On a l'estimation suivante :

$$||1\!\!1_{\{|x|>\delta|t|\}} < x >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_x)}u|| \leq C < t >^{-\mu} ||u||$$

où le majorant est intégrable car $\mu > 1$. On écrit maintenant :

$$(e^{-it(-\Delta_x)}u)(x) = (2\pi)^{-n} \int e^{ix\cdot\xi} e^{-it|\xi|^2} \hat{u}(\xi) d\xi.$$

Pour $|x| < \delta|t|$ et δ assez petit, la phase $\phi(\xi) = x \cdot \xi - t|\xi|^2$ est non stationnaire sur le support de $\hat{u}$. De plus, il existe une constante $d > 0$ telle que, pour tout x dans $\{x; |x| < \delta|t|\}$ et tout $\xi \in supp\hat{u}$, on ait :

$$< x - 2t\xi > \geq d < t > .$$

Comme $\hat{u} \in \mathcal{S}$, on obtient, après deux intégrations par parties :

$$|(e^{-it(-\Delta_x)}u)(x)| \leq C < t >^{-2},$$

uniformément pour $|x| < \delta|t|$. Comme $\mu \geq 0$, on en déduit que :

$$||1\!\!1_{\{|x|<\delta|t|\}} < x >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_x)}u|| \leq C < t >^{-2} \left(\int_{|x|<\delta|t|} dx \right)^{1/2} \leq D < t >^{-3/2} .$$

□

Preuve de la proposition 3.2.2.

La première assertion est donnée par le lemme 3.2.1 puisque $h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} \in \mathcal{S}(X_a)$ et que sa transformée de Fourier est supportée en dehors de 0. D'autre part, on a :

$$e^{-it(-\Delta_a)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} = e^{-it(-\Delta_r)} g_{\omega_a} e^{-it(-\Delta_{x_a'})} h_R^{\omega_a}$$

d'après la décomposition précédente. En utilisant la transformation de Fourier, on voit que :

$$e^{-it(-\Delta_{x_a'})} h_R^{\omega_a} \to 1$$

quand $R \to \infty$, dans $L^2_{-\delta}(H_{\omega_a})$ pour tout $\delta > \frac{n-1}{2}$. Par définition, on a posé :

$$L^2_{-\delta}(H_{\omega_a}) \equiv L^2(H_{\omega_a}; < x_a' >^{-2\delta} dx_a').$$

Si $\mu > \frac{n+1}{2}$, on peut trouver un $\delta > \frac{n-1}{2}$ tel que $\mu - \delta > 1$. On a donc :

$$< r >^{-\mu+\delta} e^{-it(-\Delta_r)} g_{\omega_a} \in L^2(I\!\!R\omega_a)$$

et on a dans $L^2(X_a)$:

$$\lim_{R\to\infty} < x_a >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_a)} h_R^{\omega_a} g_{\omega_a} = < x_a >^{-\mu} e^{-it(-\Delta_r)} g_{\omega_a}.$$

De plus, en appliquant le lemme 3.2.1 à la fonction :

$$t \mapsto < r >^{-\mu+\delta} e^{-it(-\Delta_r)} g_{\omega_a},$$

on voit que celle-ci est intégrable. On en déduit donc la dernière assertion. $\square$

Preuve de la proposition 3.3.6.

D'après la remarque 3.3.4, on a, pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}(P-z)\chi e_\alpha &= (-h^2\Delta_x)\chi e_\alpha + \chi(P^a + I_a - z)e_\alpha \\ &= [-h^2\Delta_x, \chi]e_\alpha + \chi(P-\lambda)e_\alpha + \chi(\lambda - z)e_\alpha \\ &= [-h^2\Delta_x, \chi]e_\alpha + \chi I_a e_\alpha + \chi(\lambda - z)e_\alpha\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}(P^{AD}-z)\chi e_\alpha &= \Pi(-h^2\Delta_x)\chi \Pi e_\alpha + \chi(\Pi P_e \Pi - z)e_\alpha \\ &= \Pi[-h^2\Delta_x, \chi]\Pi e_\alpha + \chi(P^{AD}-\lambda)e_\alpha + \chi(\lambda - z)e_\alpha \\ &= \Pi[-h^2\Delta_x, \chi]\Pi e_\alpha + \chi V^{AD} e_\alpha + \chi(\lambda - z)e_\alpha.\end{aligned}$$

En appliquant $R(z;h)$(respectivement $R^{AD}(z;h)$) avec $\Re(z) = \lambda$ et en faisant $\Im(z) \to 0^\pm$, on obtient les deux premières égalités.

Comme χ, θ et I_a sont à valeurs réelles, on a, d'après ce qui précède :

$$\Im < R(\lambda \pm i0;h)\chi I_a e_\alpha, \theta I_a e_\alpha > + \Im < R(\lambda \pm i0;h)\theta I_a e_\alpha, \chi I_a e_\alpha >$$

$$= \Im < R(\lambda \pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \theta I_a e_\alpha > + \Im < R(\lambda \pm i0;h)[\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \chi I_a e_\alpha >$$

$$= \Im < [\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \theta e_\alpha > + \Im < R(\lambda \pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha >$$

$$+ \Im < [\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \chi e_\alpha > + \Im < R(\lambda \pm i0;h)[\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha, [\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha > .$$

En écrivant $[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha = h^2\Delta_x\chi e_\alpha + 2in_\alpha(\lambda)h(\nabla\chi)\cdot\omega e_\alpha$, on voit que :

$$\Im < [\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \theta e_\alpha > + \Im < [\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha, \chi e_\alpha >$$

$$= 2n_\alpha(\lambda)h(\Re < (\nabla\chi)\cdot\omega e_\alpha, \theta e_\alpha > + \Re < (\nabla\theta)\cdot\omega e_\alpha, \chi e_\alpha >) = 0,$$

grâce à une intégration par parties. On a donc la troisième égalité.

Pour prouver la dernière, on utilise la deuxième égalité et on a :

$$\Im < R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\chi V^{AD} e_\alpha, \theta V^{AD} e_\alpha > + \Im < R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\theta V^{AD} e_\alpha, \chi V^{AD} e_\alpha >$$

$$= \Im < \chi e_\alpha, \theta V^{AD} e_\alpha > + \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \theta V^{AD} e_\alpha >$$

$$+ \Im < \theta e_\alpha, \chi V^{AD} e_\alpha > + \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi V^{AD} e_\alpha >$$

$$= \Im < \Pi\chi e_\alpha, \theta(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \theta V^{AD} e_\alpha >$$

$$+ \Im < \Pi\theta e_\alpha, \chi(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0;h)[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi V^{AD} e_\alpha >$$

puisque $V^{AD}e_\alpha = (\Pi(-h^2\Delta_x)\Pi + \Pi P_e - \lambda)e_\alpha$ et que la contribution de $\Pi P_e - \lambda$ est nulle. De nouveau grâce à cette deuxième égalité, la quantité cherchée vaut :

$$= \Im < \Pi\chi e_\alpha, \theta(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha > + \Im < [\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \theta\Pi e_\alpha >$$
$$+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha >$$
$$+ \Im < \Pi\theta e_\alpha, \chi(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha > + \Im < [\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi\Pi e_\alpha >$$
$$+ \Im < \Pi R^{AD}(\lambda \pm i0; h)[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, [\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha >$$

Il reste à voir que la somme des premier, deuxième, quatrième et cinquième termes est nulle. Cette somme est :

$$\Im < (-h^2\Delta_x)\chi\Pi e_\alpha, \theta\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi\chi e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \theta\Pi e_\alpha >$$

$$+ \Im < (-h^2\Delta_x)\theta\Pi e_\alpha, \chi\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi\theta e_\alpha, [\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha > + \Im < \Pi[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \chi\Pi e_\alpha >$$

et vaut :

$$2\Im(\Re < (-h^2\Delta_x)\chi\Pi e_\alpha, \theta\Pi e_\alpha >) + 2\Im(\Re < \Pi\chi e_\alpha, [\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha >)$$
$$+ 2\Im(\Re < \Pi[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha, \theta\Pi e_\alpha >) = 0.$$

$\square$

D Annexe de la partie 4.

Preuve du lemme 4.1.1.

Prenons $x \in I\!R^n$, $z \in \Gamma(x)$ (respectivement $z \in \Gamma(\infty)$) lorsqu'il s'agit de $P_e(\cdot; h)$ (respectivement $P^a(h)$). En calculant sur l'espace de Schwartz, on a :

$$e^{s<y>}(P^a(h) - z)e^{-s<y>}(P^a(h) - z)^{-1} = I + e^{s<y>}[P^a(h), e^{-s<y>}](P^a(h) - z)^{-1}$$

et :

$$e^{s<y>}(P_e(x; h) - z)e^{-s<y>}(P_e(x; h) - z)^{-1} = I + e^{s<y>}[P_e(x; h), e^{-s<y>}](P_e(x; h) - z)^{-1}.$$

Or, on a :

$$\begin{aligned} [P_e(x; h), e^{-s<y>}] = [P^a(h), e^{-s<y>}] &= [-\Delta_y + HE, e^{-s<y>}] \\ &= e^{-s<y>}(A(y) \cdot \nabla_y + B(y)) \end{aligned}$$

avec $||A(y)|| + ||B(y)|| = O(s)$, uniformément h. Ainsi, les opérateurs :

$$e^{s<y>}[P^a(h), e^{-s<y>}](P^a(h) - z)^{-1} \text{ et } e^{s<y>}[P_e(x; h), e^{-s<y>}](P_e(x; h) - z)^{-1}$$

sont bornés sur $L^2(I\!R_y^{nN})$ et vérifient :

$$||e^{s<y>}[P^a(h), e^{-s<y>}](P^a(h) - z)^{-1}|| = O(s),$$

uniformément en h et $z \in \Gamma(\infty)$, et :

$$||e^{s<y>}[P_e(x;h), e^{-s<y>}](P_e(x;h)-z)^{-1}|| = O(s),$$

uniformément en h, $x \in I\!R^n$ et $z \in \Gamma(x)$. Par conséquent, les opérateurs :

$$e^{s<y>}(P^a(h)-z)e^{-s<y>}(P^a(h)-z)^{-1} \text{ et } e^{s<y>}(P_e(x;h)-z)e^{-s<y>}(P_e(x;h)-z)^{-1}$$

sont bornés, inversibles pour s assez petit et leurs inverses respectifs $U_0(z;h)$ et $U(x,z;h)$ sont uniformément bornés en h et $z \in \Gamma(\infty)$, respectivement en h, $x \in I\!R^n$ et $z \in \Gamma(x)$. Comme on a :

$$e^{-s<y>}\Pi_0(h)e^{s<y>} = \frac{1}{2i\pi}\int_{|z-E_0|=\delta/2}(z-P^a(h))^{-1}U_0(z;h)dz$$

et :

$$e^{-s<y>}\Pi(x;h)e^{s<y>} = \frac{1}{2i\pi}\int_{\Gamma(x)}(z-P_e(x;h))^{-1}U(x,z;h)dz,$$

$e^{-s<y>}\Pi_0(h)e^{s<y>}$ est uniformément borné en h, l'application $x \mapsto e^{-s<y>}\Pi(x;h)e^{s<y>} \in \mathcal{L}(L^2(I\!R^{nN}_y))$ est bien définie et est uniformément bornée en x et h. $\square$

Preuve de la proposition 4.1.2.

Commençons par établir l'estimation (4.1 ;8) :

$$\forall \alpha \in I\!N^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}$$

uniformément pour h assez petit. Notons tout d'abord que, si $\psi \in L^2(I\!R^{nN}_y)$, on a, d'après (4.1 ;1), (4.1 ;2) et (4.1 ;3), la relation (4.1 ;9) suivante :

$$||\Pi_0(h) - \Pi_0(0)|| = O(h^2)$$

et donc :

$$||(1-\Pi_0(0))\Pi_0(h)(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\psi|| \leq \frac{1}{2}||\Pi_0(h)(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\psi||$$

pour h assez petit. On est donc ramené à estimer la norme de $\Pi_0(0)\Pi_0(h)(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)$. Considérons $(\phi_j)_{1\leq j\leq m}$ une base orthonormée de $Im\Pi_0(0)$. La quantité $(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)$ est constitué de potentiels du type :

$$(\partial^\alpha V)(x + L_h(y) + L(y))$$

où $L_h, L \in \mathcal{L}(I\!R^{nN}; I\!R^n)$ avec $||L_h|| = O(h^2)$, L indépendant de h et V vérifiant (D_ρ). Si $\phi_j(h) = \Pi_0(h)\phi_j$, on a donc :

$$\begin{array}{rcl} |(\partial^\alpha V)(x+L_h(y)+L(y))\phi_j(h)(y)| & \leq & C < x + L_h(y) + L(y) >^{-\rho-|\alpha|} |\phi_j(h)(y)| \\ & \leq & C' < x >^{-\rho-|\alpha|} < L_h(y)+L(y) >^{\rho+|\alpha|} |\phi_j(h)(y)| \\ & \leq & C'' < x >^{-\rho-|\alpha|} < L(y) >^{\rho+|\alpha|} |\phi_j(h)(y)|. \end{array}$$

Grâce à la décroissance exponentielle des ϕ_j (cf. (1.2 ;1)) et au lemme 4.1.1, on obtient l'estimation cherchée.

On montre maintenant l'estimation (4.1 ;10) suivante :

$$\forall\alpha \in I\!N^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ ||\partial_x^\alpha(\Pi(x;h) - \Pi_0(h))\Pi_0(h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|}$$

uniformément pour h assez petit.

Pour $< x >\leq R_1$, il suffit de vérifier que $||\partial_x^\alpha \Pi(x;h)||$ est uniformément borné en x et h. Comme l'application $x \mapsto P_e(x;h)$ est continue en norme des résolvantes, uniformément en h, $\Pi(x;h)$ est donné, au voisinage de chaque point x_0, par l'expression (4.1 ;5), où $\Gamma(x)$ est remplacé par $\Gamma(x_0)$. Le résultat découle maintenant du fait que la distance du spectre de $P_e(x;h)$ à $\Gamma(x_0)$ est minorée, sur ce voisinage, par une quantité strictement positive et indépendante de x et h, et d'un argument de compacité.

Pour $< x >\geq R_1$, $\Gamma(x)$ est donné par (4.1 ;2) si bien que l'on a :

$$\Pi(x;h) - \Pi_0(h) = \frac{1}{2i\pi}\int_{|z-E_0|=\delta/2}(z - P_e(x;h))^{-1}I_a(x;h)(z - P^a(h))^{-1}dz.$$

D'après l'hypothèse (D_ρ), on peut utiliser la formule de Leibnitz :

$$\partial_x^\alpha[(z-P_e(x;h))^{-1}I_a(x;h)(z-P^a(h))^{-1}] = \sum_{\beta\leq\alpha} C_\alpha^\beta \partial_x^\beta[(z-P_e(x;h))^{-1}]\partial_x^{\alpha-\beta}[I_a(x;h)(z-P^a(h))^{-1}].$$

La contribution de I_a est déterminée par la propriété :

$$\forall\alpha \in I\!N^n,\ \forall x \in I\!R^n,\ \partial_x^\alpha(I_a(x;h)(z - P^a(h))^{-1})\Pi_0(h) = (\partial_x^\alpha I_a^\pm)(x;h)(z - P^a(h))^{-1}\Pi_0(h)$$

où $I_a^\pm(x;h)$ est obtenu à partir de $I_a(x;h)$ en remplaçant les V_{2j} par $\pm V_{2j}$, pour $j \in A_1'$, suivant la parité de $|\alpha|$. Puisque l'on a obtenu l'estimation (4.1 ;8) en traitant séparément les termes constituant I_a, cette contribution est en $O(< x >^{-\rho-|\alpha|+|\beta|})$, uniformément en z et h, pour $|z - E_0| = \delta/2$. Comme la résolvante $(z - P_e(x;h))^{-1}$ est bornée par une constante, uniforme en z, x et h, pour $|z - E_0| = \delta/2$, les termes constituant $\partial_x^\beta(z - P_e(x;h))^{-1}$ sont au moins $O(< x >^{-\rho-|\beta|})$ avec la même uniformité, sauf pour $\beta = 0$ où le terme est uniformément borné. On en déduit donc l'estimation (4.1 ;10).

Pour prouver (4.1 ;6), on peut se limiter, comme pour l'estimation (4.1 ;10), au cas où $|x|$ est grand. On établit d'abord :

$$\lim_{|x|\to\infty} \sup_{h\in[0,h_\delta]} ||\Pi(x;h) - \Pi_0(h)|| = 0.$$

C'est là qu'intervient l'hypothèse de stabilité faite sur les $e_j(h)$ (cf.$(H_\delta)''$). On reprend les arguments de [K] en suivant la dépendance en h.

Soient $(\phi_j(h))_{1\leq j\leq m}$ une base orthonormée de $Im\Pi_0(h)$. Posons $\phi_j(x;h) = \Pi(x;h)\phi_j(h)$. On a :

$$\begin{aligned} < \phi_j(x;h), \phi_k(x;h) > &= < \Pi(x;h)\phi_j(h), \phi_k(h) > \\ &= \delta_{jk}+ < (\Pi(x;h) - \Pi_0(h))\Pi_0(h)\phi_j(h), \phi_k(h) > \end{aligned}$$

D'après (4.1 ;10), le dernier terme est un $O(< x >^{-\rho})$, uniformément en h. Soit $R_2 \geq R_1$ tel que les $\phi_j(x;h)$ forment une base de $Im\Pi(x;h)$ pour $< x >\geq R_2$. On note par $(\tilde{\phi}_j(x;h))_{1\geq j\geq m}$ la base duale. On a donc, pour $< x >\geq R_2$:

$$\begin{aligned}\Pi(x;h)-\Pi_0(h) &= \sum_{j=1}^{m} < \tilde{\phi}_j(x;h),\cdot > \phi_j(x;h) - \sum_{j=1}^{m} < \phi_j(h),\cdot > \phi_j(h)\\ &= \sum_{j=1}^{m} < \tilde{\phi}_j(x;h)-\phi_j(h),\cdot > \phi_j(x;h) + \sum_{j=1}^{m} < \phi_j(h),\cdot > (\phi_j(x;h)-\phi_j(h))\end{aligned}$$

Comme :

$$||\phi_j(x;h)-\phi_j(h)|| + ||\tilde{\phi}_j(x;h)-\phi_j(x;h)|| = O(< x >^{-\rho}),$$

on a :

$$||\Pi(x;h)-\Pi_0(h)|| = O(< x >^{-\rho}),$$

pour $< x >\geq R_2$, uniformément en h, c'est-à-dire (4.1 ;6) pour $|\alpha| = 0$. Soit $R_3 \geq R_2$ tel que l'on ait l'estimation (4.1 ;11) :

$$||\Pi(x;h)-\Pi_0(h)|| \leq 1/2,$$

pour $< x >\geq R_3$, uniformément en h.

On montre (4.1 ;6) par récurrence sur $|\alpha|$. Supposons que l'on ait cette estimation pour $|\alpha| < p$. Prenons $\alpha \in I\!N^n$ avec $|\alpha| = p$.

D'après la relation :

$$\begin{aligned}\Pi(x;h)-\Pi_0(h) &= (\Pi(x;h)-\Pi_0(h))^2 - 2\Pi_0(h) + \Pi(x;h)\Pi_0(h) + \Pi_0(h)\Pi(x;h)\\ &= (\Pi(x;h)-\Pi_0(h))^2 + (\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\Pi_0(h) + \Pi_0(h)(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)),\end{aligned}$$

on a :

$$\begin{aligned}\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)) &= \sum_{\beta\neq 0,\,\beta<\alpha} C_\alpha^\beta \partial_x^\beta(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\partial_x^{\alpha-\beta}(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\\ &\quad +(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\\ &\quad +(\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)))(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\\ &\quad +\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\Pi_0(h) + \Pi_0(h)\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)).\end{aligned}$$

Pour $|x| \geq R_3$, on a donc, d'après (4.1 ;11) :

$$||(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)) + (\partial_x^\alpha(\Pi(x;h)-\Pi_0(h)))(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))|| \leq \frac{1}{2}||\partial_x^\alpha(\Pi(x)-\Pi_0)||$$

et on trouve (4.1 ;6) pour $|\alpha| = p$ en utilisant l'hypothèse de récurrence et (4.1 ;10).

Montrons maintenant (4.1 ;7). Là aussi, il suffit d'obtenir l'estimation pour $|x|$ grand. On a :

$$\begin{aligned}(\Pi(x;h)P_e(x;h)\Pi(x;h)-E_0)\phi_j(x;h) &= \Pi(x;h)P_e(x;h)(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\phi_j(h)\\ &\quad +\Pi(x;h)(P_e(x;h)-E_0)\Pi_0(h)\phi_j(h),\\ &= \Pi(x;h)P_e(x;h)(\Pi(x;h)-\Pi_0(h))\phi_j(h)\\ &\quad +\Pi(x;h)I_a(x;h)\Pi_0(h)\phi_j(h)\end{aligned}$$

avec les mêmes $\phi_j(x;h)$ et $\phi_j(h)$ que précédemment. Comme $\Pi(x;h)P_e(x;h)$ est uniformément borné en x et h, l'estimation découle de (4.1 ;6) et de (4.1 ;8).

Il reste à établir l'estimation suivante :

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ \exists D_\alpha > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ ||(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h)|| \leq D_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|},$$

uniformément en h. On peut encore supposer $|x|$ grand. Comme pour $(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h)$, on peut se ramèner à $(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h)\Pi_0(h)$ d'après (4.1 ;6) puis à $(\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h)\Pi_0(h)\Pi_0(0)$ grâce à (4.1 ;9). Dans ce cas, le lemme 4.1.1 et la décroissance exponentielle des fonctions propres associées à E_0 (cf. (1.2 ;1)) permettent de conclure. $\square$

Preuve de la proposition 4.1.3.

On donne ici les détails de la preuve. On s'intéresse donc à :

$$[V(x + L_h(y) + L(y)) - V(x + L(y))](z - P_e(x;h))^{-1}\Pi(x;h) =$$

$$\int_0^1 \nabla V(x+tL_h(y)+L(y))\cdot L_h(y) < y >^{-1} dt\ \ < y > (z-P_e(x;h))^{-1} < y >^{-1} < y > \Pi(x;h),$$

en calculant sur des fonctions de l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}_y^{nN})$. L'opérateur $< y > (z - P_e(x;h))^{-1} < y >^{-1}$ est uniformément borné en x,h et $z \in \Gamma(x)$ (cf. la preuve du lemme 4.1.1), $||L_h < y >^{-1} || = O(h^2)$ et la fonction ∇V est bornée (cf. (D_ρ)). Il ne reste plus qu'à vérifier que $< y > \Pi(x;h)$ est uniformément borné en x et h.

Considérons le cas où $|x|$ est grand. Pour h assez petit, on est ramené, grâce au lemme 4.1.1, à $< y > \Pi_0(0)$ qui est borné en vertu de la décroissance exponentielle des fonctions propres associées à E_0 (cf. (1.2 ;1)).

A x fixé, on peut appliquer le théorème HVZ (cf. [RS3] ou bien [CFKS]) à $P_e(x;0)$ ce qui, avec l'hypothèse (H_δ), assure que les valeurs propres $\lambda_1(x;0), \ldots, \lambda_m(x;0)$ sont situées strictement au-dessous du spectre essentiel. Leur distance à ce spectre essentiel est même minorée par δ, uniformément en x et h. On peut donc appliquer les résultats de [A] à l'opérateur elliptique $P_e(x;0)$ et obtenir une décroissance exponentielle des fonctions propres associées aux valeurs propres précédentes. Pour tout $x_0 \in \mathbb{R}^n$, il existe $s_0 > 0$ tel que :

$$\forall \phi \in Im\Pi(x_0;0),\ s \leq s_0 \Longrightarrow e^{s<y>}\phi \in L^2(\mathbb{R}_y^{nN}).$$

Grâce à la continuité de l'application $x \mapsto \Pi(x;h)$ uniformément en h (cf. (4.1 ;6)), on a, au voisinage de x_0 :

$$||(1 - \Pi(x_0;h))\Pi(x;h) < y > \phi|| \leq \frac{1}{2}||\Pi(x;h) < y > \phi||$$

pour $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_y^{nN})$. D'après le lemme 4.1.1, on a donc :

$$||\Pi(x;h) < y > \phi|| \leq \frac{1}{2}||\Pi(x_0;h)e^{s_0<y>}||\ ||e^{-s_0<y>}\Pi(x;h)e^{s_0<y>}||\ ||e^{-s_0<y>} < y > \phi||$$

et $||\Pi(x;h) < y > ||$ est localement uniformément borné. Par compacité, on voit que $< y > \Pi(x;h)$ est uniformément borné en x et h.

Ainsi on a :

$$||(\Pi(x;h)-\Pi(x;0))\Pi(x;0)||+||(\Pi(x;h)-\Pi(x;0))\Pi(x;h)||=O(h^2)$$

et donc :

$$||\Pi(x;h)-\Pi(x;0)||=O(h^2)$$

uniformément en x, c'est-à-dire (4.1 ;12).

On montre maintenant que les $\lambda_j(x;h)$ sont proches des $\lambda_j(x;0)$. Fixons x et considérons une base orthonormée de $Im\Pi(x;0):\phi_1(x;0),\dots,\phi_m(x;0)$. Posons $\phi_j(x;h)=\Pi(x;h)\phi_j(x;0)$. D'après l'estimation (4.1 ;12), les fonctions $\phi_j(x;h)$ forment une base de $Im\Pi(x;h)$ pour h assez petit, indépendamment de x. On note par $\tilde{\phi}_j(x;h)$ les fonctions de la base duale et on a :

$$||\phi_j(x;h)-\phi_j(x;0)||+||\tilde{\phi}_j(x;h)-\phi_j(x;h)||=O(h^2),$$

uniformément en x. La matrice $M(x;h)$ de $P_e(x;h)$ dans la base des $\phi_j(x;h)$ a pour coefficients :

$$\begin{aligned}
<\tilde{\phi}_j(x;h),P_e(x;h)\phi_k(x;h)> &= <\phi_j(x;h),P_e(x;h)\phi_k(x;h)>+O(h^2)\\
&= <\phi_j(x;0),\Pi(x;h)P_e(x;h)\Pi(x;h)\phi_k(x;0)>+O(h^2)\\
&= <\phi_j(x;0),\Pi(x;0)P_e(x;0)\Pi(x;0)\phi_k(x;0)>+O(h^2),
\end{aligned}$$

et $||M(x;h)-M(x;0)||=O(h^2)$, où le $O(h^2)$ est indépendant de x. Les $\lambda_j(x;h)$, rangées dans l'ordre croissant, sont les valeurs propres de la matrice symétrique $M(x;h)$ que l'on peut exprimer au moyen de la formule du "minimax" suivante :

$$\lambda_j(x;h)=\min_{F\in\mathcal{E}_j}\max_{u\in F\setminus\{0\}}\frac{<M(x;h)u,u>}{||u||^2},$$

où $\mathcal{E}_j$ est l'ensemble des sous-espaces vectoriels de dimension j de $\mathbb{C}^m$. Une relation analogue donne les $\lambda_j(x;0)$ en fonction de $M(x;0)$. La majoration de la distance entre les deux matrices implique alors :

$$\lambda_j(x;h)-\lambda_j(x;0)=O(h^2),$$

pour tout $j\in<1,m>$, uniformément en x. $\square$

E Annexe de la partie 5.

Preuve de la proposition 5.1.1.

D'après le lemme 2 page 24 de [RS3] et le fait que l'opérateur $(1-\tilde{\chi}_c)(\tilde{P}_c+i)^{-1}$ est compact pour un certain $p>0$, on a :

$$s-\lim_{t\to\pm\infty}e^{itP}(1-\tilde{\chi}_c)e^{-itP_c}\tilde{\mathcal{J}}_\gamma=0$$

et, par conséquent, les opérateurs d'onde de canal, définis au paragraphe 3.2, sont donnés par :

$$\tilde{\Omega}^{\gamma}_{\pm} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP}\tilde{\chi}_c e^{-itP_c}\tilde{\mathcal{J}}_{\gamma}.$$

Un raisonnement analogue montre que l'on a aussi :

$$\Omega^{AD}_{\pm} = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itP^{AD}}\chi e^{-itP_a}\Pi_0.$$

Considérons la première étape des preuves de ces théorèmes 3.3.1 et 3.3.3. On a, pour $f_a \in \mathcal{S}(X_a)$:

$$\begin{array}{rcl}\tilde{L}_a e^{-it(-\Delta_a)}\tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a & = & ([-\Delta_a,\tilde{\chi}_a] + \tilde{\chi}_a\tilde{I}_a)e^{-it(-\Delta_a)}\tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a \\ & = & (-(\Delta_a\tilde{\chi}_a) + \tilde{\chi}_a\tilde{I}_a)e^{-it(-\Delta_a)}\tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a \\ & & -2 < \tilde{\mathcal{J}}_\alpha(\nabla_a\tilde{\chi}_a), e^{-it(-\Delta_a)}\tilde{\mathcal{J}}_\alpha(\nabla_a f_a) >_q .\end{array}$$

D'après le lemme 3.2.1, l'application :

$$I\!R \ni t \mapsto \tilde{L}_a e^{-it(-\Delta_a)}\tilde{\mathcal{J}}_\alpha f_a$$

est intégrable. De même, en notant que $L^{AD}\Pi_\alpha$ s'écrit :

$$\begin{array}{rcl}L^{AD}\Pi_\alpha & = & \Pi[-h^2\Delta_x,\chi]\Pi\Pi_\alpha + \chi V^{AD}\Pi_\alpha \\ & = & -h^2\Pi(\Delta_x\chi)\Pi\Pi_\alpha - 2h^2\Pi(\nabla_x\chi)\cdot(\nabla_x\Pi)\Pi\Pi_\alpha \\ & & -2h\Pi(\nabla_x\chi)\cdot\Pi\Pi_\alpha h\nabla_x + \chi V^{AD}\Pi_\alpha\end{array}$$

on a, d'après la preuve du théorème 3.3.3 et ce même lemme 3.2.1, l'intégrabilité de l'application :

$$I\!R \ni t \mapsto L^{AD}e^{-it(-h^2\Delta_x)}f\phi_\alpha$$

pour tout $f \in \mathcal{S}(I\!R^n)$.

D'autre part, on a, pour $f_c \in \mathcal{S}(X_c)$ (avec $\gamma \equiv (c, E_\gamma, \tilde{\phi}_\gamma) = \alpha, \beta)$:

$$\begin{array}{rcl}(\tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda)(\tilde{L}_c)^* f_c)(\theta_c) & = & - < 2i(\nabla_c\tilde{\chi}_c), n_\gamma(\lambda)\theta_c >_q (\tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda)f_c)(\theta_c) \\ & & +[\tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda)(\tilde{\chi}_c\tilde{I}_c f_c - (\Delta_c\tilde{\chi}_c)f_c)](\theta_c).\end{array}$$

On en déduit que l'opérateur $< x_c >^s_q \tilde{L}_c\tilde{\mathcal{F}}_\gamma(\lambda)^*$ est borné pour $1/2 < s < \rho/2$ et fortement continu en λ. Comme on a aussi :

$$\begin{array}{rcl}(\mathcal{F}_\gamma(\lambda)(\Pi L^{AD})^* f\phi_\gamma)(\theta) & = & -2ih^2\Pi\Pi_0\phi_\gamma(\nabla_x\chi)\cdot n_\gamma(\lambda)\theta(F_\gamma(\lambda)f)(\theta) + [F_\gamma(\lambda)(\chi\Pi V^{AD}f)](\theta) \\ & & +[-h^2\Pi(\Delta_x\chi)\Pi\phi_\gamma - 2h^2\Pi(\nabla_x\chi)\cdot(\nabla_x\Pi)\Pi\phi_\gamma][F_\gamma(\lambda)f](\theta),\end{array}$$

l'opérateur $< x >^s \Pi L^{AD}\mathcal{F}_\gamma(\lambda)^*$ est borné pour $1/2 < s < \rho/2$ et fortement continu en λ, d'après la preuve du théorème 3.3.3.

Grâce à ces propriétés, on peut reprendre le calcul de la première étape des preuves de ces théorèmes 3.4.1 et 3.4.5 et obtenir :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha}(\lambda) = -2i\pi\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(\tilde{\chi}_b\tilde{L}_a - (\tilde{L}_b)^*\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{L}_a)\tilde{\mathcal{F}}_\alpha(\lambda)^*,$$

$$T^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda) = -2i\pi\mathcal{F}_\beta(\lambda)(\chi\Pi L^{AD} - (L^{AD})^*\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD})\mathcal{F}_\alpha(\lambda)^*,$$

(car $\lambda \in I_\beta(h)$). De plus, on peut reprendre les deuxièmes, troisièmes et quatrièmes étapes et établir les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a) &= \frac{\pi}{n_\alpha(\lambda)}||\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)(\tilde{\chi}_b\tilde{L}_a - (\tilde{L}_b)^*\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{L}_a)\tilde{e}_\alpha||_{sb}^2,\\ \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda,\omega) &= \frac{\pi}{n_\alpha(\lambda)}||\mathcal{F}_\beta(\lambda)(\chi\Pi L^{AD} - (L^{AD})^*\Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD})e_\alpha||^2.\end{aligned}$$

Pour obtenir l'expression annoncée de $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a)$, on utilise la formule de Stone :

$$\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda)^*\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\lambda) = \frac{1}{2i\pi}(\tilde{R}_\beta(\lambda+i0) - \tilde{R}_\beta(\lambda-i0))$$

avec $\tilde{R}_\beta(z) = (-\Delta_b + E_\beta - z)^{-1}$ et il vient :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a) = \frac{1}{n_\alpha(\lambda)}\Im < \tilde{R}_\beta(\lambda+i0)f_{\beta\alpha}, f_{\beta\alpha} >_b$$

pour :

$$f_{\beta\alpha} = \tilde{\mathcal{J}}_\beta^*(\tilde{\chi}_b - (\tilde{L}_b)^*\tilde{R}(\lambda+i0))\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha.$$

Ensuite, on écrit :

$$\tilde{R}_\beta(z)\tilde{\mathcal{J}}_\beta^* = \tilde{\mathcal{J}}_\beta^*\tilde{R}_b(z),$$

où $\tilde{R}_b(z) = (\tilde{P}_b - z)^{-1}$, et la formule des résolvantes suivante :

$$\tilde{R}_b(z)(\tilde{\chi}_b - (\tilde{L}_b)^*\tilde{R}(z)) = \tilde{\chi}_b\tilde{R}(z).$$

En prenant la limite dans $\mathcal{L}(L_s^2(X);L_{-s}^2(X))$, pour $s > 1/2$, quand $\Im(z) \to 0$ avec $\Re(z) = \lambda$ et en reportant dans l'expression de $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a)$, on trouve :

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a) = \frac{1}{n_\alpha(\lambda)}\Im < \tilde{\chi}_b\tilde{R}(\lambda+i0)\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha, \tilde{\Pi}_\beta[\tilde{\chi}_b - (\tilde{L}_b)^*\tilde{R}(\lambda+i0))]\tilde{L}_a\tilde{e}_\alpha >_b$$

avec $\tilde{\Pi}_\beta = \tilde{\mathcal{J}}_\beta\tilde{\mathcal{J}}_\beta^*$, qui n'est autre que l'expression annoncée.

Pour la section adiabatique, on utilise la formule de Stone suivante :

$$\mathcal{F}_\beta(\lambda)^*\mathcal{F}_\beta(\lambda) = \frac{1}{2i\pi}(R_a(\lambda+i0) - R_a(\lambda-i0))\Pi_\beta$$

avec $R_a(z) = (-h^2\Delta_x + P^a - z)^{-1}$ et il vient :

$$\sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda,\omega) = \frac{1}{n_\alpha(\lambda)}\Im < R_a(\lambda+i0)f_{\beta\alpha}^{AD}, f_{\beta\alpha}^{AD} >$$

pour :

$$f_{\beta\alpha}^{AD} = \Pi_\beta(\chi - (L^{AD})^*\Pi R^{AD}(\lambda+i0))L^{AD}e_\alpha.$$

On utilise alors la formule des résolvantes suivante :

$$R_a(z)(\chi - (L^{AD})^*\Pi R^{AD}(z)) = \chi R^{AD}(z)$$

et, comme pour $\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega_a)$, on trouve l'expression annoncée de $\sigma^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda,\omega)$. $\square$

Preuve de la proposition 5.2.4.

Si $|x_\omega| \geq 3h^{-\eta}$ alors, pour tout t, le vecteur $x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega$ est en dehors du support de la fonction f_j. Si $|x_\omega| \leq h^{-\kappa}$ alors, pour tout t, la projection de $x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega$ sur H_ω, l'hyperplan orthogonal à ω, est en dehors du support de la fonction $\theta_j(h^\kappa\cdot)$. On a donc la première propriété.
D'après la définition de la couronne $C_{\gamma\eta}$ et la décroissance de la fonction f_j, on a :

$$|g_j(x)| \leq \int_0^{+\infty}(h^{-\gamma}+|x_\omega|+|x-2n_\alpha(\lambda)t\omega|)^{-\rho}dt = c(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}$$

où la constante c est indépendante de x et de h. D'autre part, on a :

$$(\nabla g_j)(x) = \int_0^{+\infty}(\nabla f_{2j})(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega)e^{-ih^{-1}\int_0^t I^0_a(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds}dt$$

$$-ih^{-1}\int_0^{+\infty} f_{2j}(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega)e^{-ih^{-1}\int_0^t I^0_a(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds}\int_0^t(\nabla I^0_a)(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)dsdt.$$

On a :

$$|(\partial^\alpha_x f_{2j})(x)| = O(h^{|\alpha|\kappa} < x >^{-\rho})$$

pour $|\alpha| \leq 2$. Par ailleurs, on a, pour tout t :

$$\int_0^{+\infty}|(\nabla I^0_a)(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)|ds \leq c\int_0^t(s+ < x_\omega >)^{-\rho-1}ds = c < x_\omega >^{-\rho}$$

et :

$$\int_0^{+\infty}|(\Delta I^0_a)(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)|ds \leq c < x_\omega >^{-\rho-1}.$$

Ces deux derniers termes sont donc respectivement des $O(h^{\kappa\rho})$ et $O(h^{\kappa(\rho+1)})$. Comme $\kappa\rho > 1$ pour δ assez petit, on voit que l'on a :

$$(\nabla g_j)(x) \leq c(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}.$$

Plus précisément, on a, pour $|x_\omega| > h^{-\kappa}$:

$$(\nabla g_j)(x) \leq O(h^\kappa(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}) + O(h^{\kappa\rho-1}(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}) \leq O(h^{\kappa\rho}) + O(h^{\kappa\rho-1+\gamma(\rho-1)})$$

avec $\gamma(\rho-1)=1$. En remarquant que $\kappa > \kappa\rho - 1 > 0$, pour δ assez petit, et en utilisant les mêmes arguments, on en déduit la quatrième propriété.
Enfin, on a :

$$f_{2j}(x) = -\int_0^{+\infty}\frac{d}{dt}\left(f_{2j}(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega)e^{-ih^{-1}\int_0^t I^0_a(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds}\right)dt$$

et, en effectuant la dérivation, on voit apparaître la dernière propriété. $\square$

Preuve du lemme 5.4.3.

On voit que l'on a $g_j(x) = \theta_2(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x)$ pour $j \in \{1,2\}$. Pour $1 \leq j,k \leq 2$, on a :

$$| < ih^{-1}\theta_1(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x), \theta_2(h^\kappa x_\omega)f_k(x) > | \leq ch^{-1}\int_{h^{-\kappa}\leq|x_\omega|\leq 2h^{-\kappa}} (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho} < x >^{-\rho} 1\!\!1_{C_{\gamma\beta}}(x)dx$$

car la deuxième propriété de la proposition 5.2.4 reste valable pour $\theta_1(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x)$ donc aussi pour $\tilde{g}_j(x)$. On évalue cette intégrale comme dans la preuve du lemme 5.2.7 et on obtient :

$$| < ih^{-1}\theta_1(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x), \theta_2(h^\kappa x_\omega)f_k(x) > | \leq ch^{-1}\int_0^{2h^{-\kappa}} (h^{-\gamma}+r)^{2-2\rho} r^{n-2}dr.$$

En effectuant le changement de variable $r = h^{-\gamma}u$, on trouve :

$$\begin{aligned} | < ih^{-1}\theta_1(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x), \theta_2(h^\kappa x_\omega)f_k(x) > | &\leq ch^{1+\gamma(1-n)}\int_0^{2h^{\gamma-\kappa}} (1+u)^{2-2\rho}u^{n-2}du \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+(\gamma-\kappa)(n-1)}), \end{aligned}$$

avec $(\gamma-\kappa)(n-1) > 0$.

On montre de même l'existence d'un $\epsilon_0 > 0$ tel que :

$$| < ih^{-1}\theta_1(h^\kappa x_\omega)\tilde{g}_j(x), \theta_1(h^\kappa x_\omega)f_k(x) > | = O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}).$$

On a donc :

$$\sum_{1\leq j,k\leq 2} \Im < ih^{-1}g_j, f_{2k} >= \Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1+\tilde{g}_2), f_1+f_2 > +O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}).$$

Rappelons que l'on a : $f_2 = \chi_2 I_a^0$ et $f_1 = 2in_\alpha(\lambda)h\nabla\chi_1\cdot\omega$. Grâce à la relation :

$$2n_\alpha(\lambda)\omega\cdot\nabla\tilde{g}_j + ih^{-1}I_a^0\tilde{g}_j = f_j,$$

on vérifie, au moyen d'une intégration par parties, que :

$$\Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1+\tilde{g}_2), f_1 >= \Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1+\tilde{g}_2), \chi_1 I_a^0 > .$$

Enfin, on peut rajouter la contribution de $\chi_3 I_a^0$. En effet, on a :

$$\begin{aligned} | < ih^{-1}\tilde{g}_j(x), \chi_3(x)I_a^0(x) > | &\leq ch^{-1}\int_{|x|>2h^{-\beta}} (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho} < x >^{-\rho} dx \\ &\leq ch^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}(h^{-\beta}+|x_\omega|)^{1-\rho}dx_\omega. \end{aligned}$$

Ce terme est controlé par :

$$h^{-1}\int_{|x_\omega|\geq 2h^{-\kappa}} (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}(h^{-\beta}+|x_\omega|)^{1-\rho}dx_\omega \leq ch^{-1}\int_1^{+\infty}(h^{-\gamma}+r)^{1-\rho}(h^{-\beta}+r)^{1-\rho}r^{n-2}dr.$$

En posant $r = h^{-\beta}u$, il est majoré par :

$$ch^{-1-\beta-\beta(n-2)+2\beta(\rho-1)}\int_1^{+\infty}(h^{\beta-\gamma}+u)^{1-\rho}(1+u)^{1-\rho}u^{n-2}du,$$

où l'intégrale est uniformément bornée en h. L'ordre en h de ce terme est donc $-1-\gamma(1+\delta)(n-1)+2(1+\delta) = 1+\gamma(1-n)+\delta(2-\gamma(n-1))$ avec $\gamma(n-1) < 2$ (car $\rho > \frac{n+1}{2}$). $\square$

Preuve du lemme 5.4.4.

Pour $j \in< 1,3 >$, on pose :

$$g_j^\star(x) = \int_0^{+\infty} (\chi_j I_a^0)(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega) e^{-ih^{-1}\int_0^t I_a^0(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds} dt.$$

On a bien sûr $g_2^\star = \tilde{g}_2$. En utilisant le fait que :

$$f_1(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega) = 2n_\alpha(\lambda)\omega\cdot\nabla\chi_1(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega) = -\frac{d}{dt}(\chi_1(x-2n_\alpha(\lambda)t\omega)),$$

on obtient par intégration par parties $ih^{-1}\tilde{g}_1 = -\chi_1 + ih^{-1}g_1^\star$. Puisque les fonctions sont à valeurs réelles, on a $\Im < \chi_1, I_a^0 >= 0$. On en déduit donc :

$$\Im < ih^{-1}(\tilde{g}_1+\tilde{g}_2), I_a^0 >= \Im < ih^{-1}(g_1^\star+g_2^\star), I_a^0 > +O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}).$$

De plus, en adaptant la deuxième propriété de la proposition 5.2.4, on a :

$$\begin{aligned} |< ih^{-1}g_3^\star(x), I_a^0(x) >| &\leq ch^{-1}\int_{|x|>2h^{-\beta}} (h^{-\beta}+|x_\omega|)^{1-\rho} < x >^{-\rho} dx \\ &\leq ch^{-1}\int (h^{-\beta}+|x_\omega|)^{2-2\rho} dx_\omega. \end{aligned}$$

Comme précédemment, on a :

$$h^{-1}\int_{|x_\omega|<2h^{-\kappa}} (h^{-\beta}+|x_\omega|)^{2-2\rho} dx_\omega = O(h^{1+\gamma(1-n)+(\beta-\kappa)(n-1)}),$$

ce qui termine la preuve de ce lemme. $\square$

Références

[A] S.Agmon : *Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations.* Princeton University Press, 1982.

[AJS] W.O.Amrein, J.M.Jauch, K.B.Sinha : *Scattering Theory in Quantum Mechanics. Physical Principles and Mathematical Methods.* Lecture notes and supplements in Physics, David Pines, 1977.

[BO] M.Born, R.Oppenheimer : *Zur Quantentheorie der Molekeln.* Annalen der Physik, 84, 457, 1927.

[Ce] S.Cerbah : *Principe d'absoption limite semi-classique pour l'opérateur de Dirac.* preprint.

[CDS] J.M.Combes, P.Duclos, R.Seiler : *The Born-Oppenheimer Approximation.* Rigourous Atomic and Molecular Physics, eds. Wightman and Velo, Plenum, New York, 1981.

[CFKS] H.L.Cycon, R.G.Froese, W.Kirsch, B.Simon : *Schrödinger operators with application to quantum mechanics and global geometry.* Springer Verlag 1987.

[CT] J.M.Combes, A.Tip : *Properties of the scattering amplitude for electron-atom collisions.* Ann. I.H.P., vol. 40, n° 2, 1984, p. 117-139.

[ES] V.Enss, B.Simon : *Finite Total Cross-Section in Nonrelativistic Quantum Mechanics.* Commun. Math. Phys. 76,177-209 (1980).

[GM] C.Gérard, A.Martinez : *Principe d'absorption limite pour des opérateurs de Schrödinger à longue portée.* C.R. Acad. Sci. 306, 121-123, 1988.

[Ha1] G.A.Hagedorn : *High-order correction to the time-independent Born-Oppenheimer approximation.* Ann. IHP 47, 1-16, (1987).

[Ha2] G.A.Hagedorn : *Proof of the Landau-Zener Formula in an Adiabatic Limit with Small Eigenvalue Gaps.* Commun. Math. Phys. 136, 443-449 (1991).

[HJ] G.A.Hagedorn, A.Joye : *Landau-Zener Transitions Through Small Electronic Eigenvalue Gaps in the Born-Oppenheimer Approximation.* preprint CPT septembre 95.

[HR] B.Helffer, D.Robert : *Calcul fonctionnel par la transformation de Melin et opérateurs admissibles.* J. Funct. Anal. 53 (1983), 246-268.

[HS] B.Helffer, J.Sjöstrand : *Opérateurs de Schrödinger avec champs magnétiques faibles et constants.* Exposé No. XII, Séminaire EDP, février 1989, Ecole Polytechnique.

[Hö] L.Hörmander : *The Analysis of Linear Partial Differential Operators III.* Springer Verlag 1985.

[I1] H.T.Ito : *High-energy behavior of the total scattering cross sections for 3-body quantum systems.* preprint.

[I2] H.T.Ito : *The semiclassical asymptotics of the total cross-sections for elastic scattering for N-body systems.* preprint.

[JMP] A.Jensen, E.Mourre, P.Perry : *Multiple commutator estimates and resolvant smoothness in quantum scattering theory.* Ann. IHP 41, 207-225, 1984

[Kar] A.Kargol : *The infinite limit for the time-dependent Born-Oppenheimer approximation.* Commun. Math. Phys. 166, 129-148, (1994).

[K] T.Kato : *Perturbation Theory for Linear Operators.* Springer, Berlin, 1976.

[KMSW] M.Klein, A.Martinez, R.Seiler, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer Expansion for Polyatomic Molecules.* Commun. Math. Phys. 143, 606-639, 1992.

[KMW1] M.Klein, A.Martinez, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer Approximation of Wave Operators in Molecular Scattering Theory.* Commun. Math. Phys. 152, 73-95, 1993.

[KMW2] M.Klein, A.Martinez, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer Aproximation of Wave Operators II : Singular Potentials.* preprint.

[MN] Ph.A.Martin, G.Nenciu : *Semi-classical inelastic S-matrix for one-dimensionnal N-states systems.* preprint.

[Ma1] A.Martinez : *Développements asymptotiques et effet tunnel dans l'approximation de Born-Oppenheimer.* Ann. IHP 49, 239-257 (1989).

[Ma2] A.Martinez : *Sur l'approximation de Born-Oppenheimer des opérateurs d'onde.* Séminaires EDP de l'Ecole Polytechnique 1994-95.

[Ma3] A.Martinez : *Résonances dans l'Approximation de Born-Oppenheimer I.* J. Diff. Eq. 91, 204-234 (1991).

[MM] A.Martinez, B.Messirdi : *Resonnaces of Diatomic Molecules in the Born-Oppenheimer Approximation.* Comm. in PDE, vol. 19, 1139-1162, 1994.

[Me] B.Messirdi : *Asymptotique de Born-Oppenheimer pour la prédissociation moléculaire (cas de potentiels réguliers).* Ann. IHP 61, 255-292, (1994).

[Mo] E.Mourre : *Absence of singular continuous spectrum for certain self-adjoint operators.* Commun. in Math. Phys. 78, 391-408, 1981.

[PSS] P.Perry, I.M.Sigal, B.Simon : *Spectral analysis of N-body Schrödinger operators.* Ann. of Math. 114 (1981), 519-567.

[Ra] A.Raphaelian : *Ion-Atom Scattering within a Born-Oppenheimer Framework.* Disertation TU Berlin, 1986.

[RS1] M.Reed, B.Simon : *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome I : Functional Analysis.* Academic Press 1972.

[RS2] M.Reed, B.Simon : *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome II : Fourier Analysis, Self-adjointness.* Academic Press.

[RS3] M.Reed, B.Simon : *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome III : Scattering Theory.* Academic Press 1979.

[RS4] M.Reed, B.Simon : *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome IV : Analysis of Operators.* Academic Press.

[Ro] D.Robert : *Autour de l'approximation semi-classique.* Birkhäuser 1987.

[RT] D.Robert, H.Tamura : *Semiclassical estimates for resolvents and asymptotics for total cross-section.* Ann. IHP 46, 415-442, 1987.

[RW] D.Robert, X.P.Wang : *Pointwise Semiclassical Asymptotics for Total Cross Sections in N-body Problems.* Dans “Spectral and Scattering Theory” p181-196, Lectures Notes in Pure and Applied Mathematic, vol. 161, Marcel Dekker, 1994.

[S] R.Seiler : *Does the Born-Oppenheimer Approximation works ?* Helv. Phys. Acta 46, 230-234 (1973).

[SS] I.M.Sigal, A.Soffer : *The N-particle scattering problem : asymptotic completeness for short range systems.* Ann. of Math. 126 (1987), 35-108.

[T] B.Thaller : *The Dirac Equation.* Springer Verlag 1992.

[W1] X.P.Wang : *Time-Decay of Scattering Solutions and Resolvent Estimates for Semiclassical Schrödinger Operators.* J. Diff. Eq. 71, 348-396 (1988).

[W2] X.P.Wang : *Time-Decay of Scattering Solutions and Classical Trajectories.* Ann. IHP 47, 25-37,1987.

[W3] X.P.Wang : *Time-Delay Operators in the Semiclassical Limit II, Short Range Potentials.* Trans. AMS 322, 1990.

[W4] X.P.Wang : *Semiclassical Resolvent Estimates for N-body Schrödinger Operators.* J. Funct. Anal. 97, 466-483, (1991).

[W5] X.P.Wang : *Total Cross Sections in N-body Problems : Finitness and High Energy Asymptotics.* Comm.Math.Phys. 156, 333-354, 1993.

[W6] X.P.Wang : *Approximation semi-classique de l'équation d'Heisenberg.* Commun. in Math. Phys. 104, 77-86 (1986).

[W7] X.P.Wang : *Puits multiples pour l'opérateur de Dirac.* Ann. IHP 43, 269-319, (1985).

[Y] D.R.Yafaev : *The Eikonal approximation and the asymptotics of the total scattering cross-section for Schrödinger equation.* Ann. IHP 44, n° 4, 1986, 397-425.

Table des matières